

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2003-108972

(P2003-108972A)

(43) 公開日 平成15年4月11日 (2003.4.11)

(51) Int.Cl. ⁷	識別記号	F I	テーマコード* (参考)
G 0 6 N 3/12		G 0 6 N 3/12	
3/00	5 5 0	3/00	5 5 0 C

審査請求 有 請求項の数 9 O L (全 45 頁)

(21) 出願番号 特願2002-160809 (P2002-160809)

(22) 出願日 平成14年5月31日 (2002.5.31)

(31) 優先権主張番号 特願2001-228318 (P2001-228318)

(32) 優先日 平成13年7月27日 (2001.7.27)

(33) 優先権主張国 日本 (J P)

(71) 出願人 301021533
独立行政法人産業技術総合研究所
東京都千代田区霞が関1-3-1

(72) 発明者 村川 正宏
茨城県つくば市東1-1-1 独立行政法人産業技術総合研究所つくばセンター内

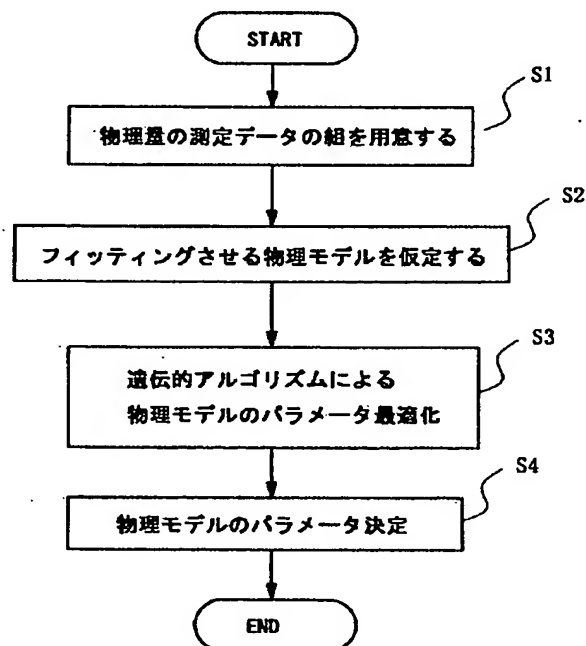
(72) 発明者 樋口 哲也
茨城県つくば市東1-1-1 独立行政法人産業技術総合研究所つくばセンター内

(54) 【発明の名称】 最適フィッティングパラメータ決定方法および装置、並びに最適フィッティングパラメータ決定プログラム

(57) 【要約】

【課題】 初期値に依存することなく、局所的なピークにとらわれることなく、短い計算時間で効率的に物理モデルのフィッティングパラメータを最適化する。

【解決手段】 物理モデルのパラメータを遺伝的アルゴリズムの染色体情報として実数ベクトルで表現し、染色体で表現された複数の個体を用意して遺伝的アルゴリズムにより物理量の測定データ点に対してフィッティング最適化する。遺伝的アルゴリズムの交叉処理の子個体は、三つの親個体から決定される正規分布確率で生成し、置換処理は、選択された親個体、複数の子個体から、全ての基準で優れている個体を次世代集団の個体とする。さらに複数の実験条件における測定データ点の組毎に最適なフィッティングパラメータを求め、実験条件間においてもフィッティングパラメータがなめらかに変化するように総合的にフィッティングさせる。これにより、実験を行っていない実験条件においても誤差なく物理現象を物理モデルでシミュレーションできる。



【特許請求の範囲】

【請求項1】 複数のパラメータを有する物理モデルにおいて、物理量の測定により取得された離散的なデータ点に対する最適なフィッティングパラメータを決定するために、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として前記パラメータを実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を用意して遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータの最適化することを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項2】 前記遺伝的アルゴリズムが、少なくとも二つの親個体を選択する選択処理工程と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成工程と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理工程とを、少なくとも備えたことを特徴とする請求項1記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項3】 前記子個体生成工程において、前記交叉処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体おのおの実数ベクトル成分に基づいて設定されることを特徴とする請求項2記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項4】 前記子個体生成工程において、前記突然変異処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のうち少なくとも一つの親個体に近付くに連れて生起確率が高くなることを特徴とする請求項2記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項5】 前記選択処理工程において、三つの親個体を選択し、前記生起確率分布は、前記選択された三つの親個体のうち二つの親個体の中点を中心とした正規分布であって、正規分布の標準偏差は、前記二つの親個体の実数ベクトルを結ぶ主軸方向の成分が前記二つの親個体の距離に比例し、それ以外の軸の成分が選択された三つの親個体のうち残り一つの親個体と主軸との距離に比例することを特徴とする請求項3記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項6】 前記複数の個体の集団を格子点上に配置し、前記選択処理工程において、各個体と近傍の所定数の個体との間で地域的な小集団を形成し、地域的な小集団の中から少なくとも二つの親個体を選択することを特徴とする請求項2ないし請求項5記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項7】 前記置換処理工程において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、1種類の評価基準がより優れている個体を次世代集団の個体とすることを特徴とする請求項2ないし請求項6記載の最適フィッ

ティングパラメータ決定方法。

【請求項8】 前記置換処理工程において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、2種類以上の評価基準の優越関係に基づいて次世代集団の個体を決定することを特徴とする請求項2ないし請求項6記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項9】 前記遺伝的アルゴリズムを用いて最適化したフィッティングパラメータに対して、局所的探索手法による最適化を行うことを特徴とする請求項1ないし8に記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項10】 前記物理モデルは異なる実験条件毎に用意され、実験条件を段階的に変化させて測定データの組を複数用意し、最適化手法によって測定データの組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、該フィッティングパラメータは、実験条件間の変化がなめらかになるようにフィッティング関数でフィッティングされ、実験条件毎の物理モデルの最適なフィッティングパラメータを総合的に決定することを特徴とする請求項1ないし請求項9記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項11】 前記最適化手法は、局所的探索手法により行われることを特徴とする請求項10記載の最適フィッティングパラメータ決定方法。

【請求項12】 複数のパラメータを有する物理モデルの最適なフィッティングパラメータを決定する装置であって、物理量の測定により取得された離散的なデータ点に対し、測定データと物理モデルから計算した予測値に基づいて適応度を算出する適応度算出手段と、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として前記パラメータを実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団に対して遺伝的アルゴリズムの遺伝的操作を行う遺伝的操作処理手段と、次世代個体集団が評価基準を満たすか否かを判断する判断手段とを備え、次世代個体集団が評価基準を満たしたときの個体集団の中の高い適応度をもつ個体により、前記物理モデルの最適なフィッティングパラメータとすることを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項13】 前記遺伝的操作処理手段は、少なくとも二つの親個体を選択する選択処理部と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成部と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理部とを少なくとも備えたことを特徴とする請求項12記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項14】 前記子個体生成部において、前記交叉処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体おのおの実数

ベクトル成分に基づいて設定されることを特徴とする請求項13記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項15】 前記子個体生成部において、前記突然変異処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のうち少なくとも一つの親個体に近付くに連れて生起確率が高くなることを特徴とする請求項13記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項16】 前記選択処理部において、三つの親個体を選択し、前記生起確率分布は、前記選択された三つの親個体のうち二つの親個体の中点を中心とした正規分布であって、正規分布の標準偏差は、前記二つの親個体の実数ベクトルを結ぶ主軸方向の成分が前記二つの親個体の距離に比例し、それ以外の軸の成分が選択された三つの親個体のうち残りの一つの親個体と主軸との距離に比例することを特徴とする請求項14記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項17】 前記複数の個体の集団を格子点上に配置し、前記選択処理部において、各個体と近傍の所定数の個体との間で地域的な小集団を形成し、地域的な小集団の中から少なくとも二つの親個体を選択することを特徴とする請求項13ないし請求項16記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項18】 前記置換処理部において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、1種類の評価基準がより優れている個体を次世代集団の個体とすることを特徴とする請求項13ないし請求項17記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項19】 前記置換処理部において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、2種類以上の評価基準の優越関係に基づいて次世代集団の個体を決定することを特徴とする請求項13ないし請求項17記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項20】 前記遺伝的アルゴリズムを用いて最適化したフィッティングパラメータに対して、局所的探索手法による最適化を行う処理手段を有することを特徴とする請求項12ないし19記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項21】 段階的に変化した実験条件毎に用意された複数の測定データの組に対し、最適化手法によって測定データの組毎に最適なフィッティングパラメータを求める最適化手段と、該フィッティングパラメータを実験条件間の変化がなめらかになるようにフィッティング関数でフィッティングするパラメータフィッティング処理手段を有し、前記適応度算出手段は前記パラメータフィッティング処理手段によって求めたフィッティングパラメータに基づいて適応度を算出することを特徴とする請求項13ないし請求項19記載の最適フィッティング

パラメータ決定装置。

【請求項22】 前記最適化手段は、局所的探索手法により最適化を行うことを特徴とする請求項21記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項23】 複数のパラメータを有する物理モデルのパラメータを、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を、遺伝的アルゴリズムを用いて最適化することにより最適なフィッティングパラメータを得ることをコンピュータに実施させることを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項24】 前記遺伝的アルゴリズムは、少なくとも二つの親個体を選択する選択処理工程と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成工程と、物理モデルを計算し生成した子の適応度を計算する適応度計算工程と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、前記計算された適応度に基づき次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理工程とを、少なくとも備えたことを特徴とする請求項23記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項25】 前記子個体生成工程において、前記交叉処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体おのおの実数ベクトル成分に基づいて設定されることを特徴とする請求項24記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項26】 前記子個体生成工程において、前記突然変異処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のうち少なくとも一つの親個体に近付くに連れて生起確率が高くなることを特徴とする請求項24記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項27】 前記選択処理工程において、三つの親個体を選択し、前記生起確率分布は、前記選択された三つの親個体のうち二つの親個体の中点を中心とした正規分布であって、正規分布の標準偏差は、前記二つの親個体の実数ベクトルを結ぶ主軸方向の成分が前記二つの親個体の距離に比例し、それ以外の軸の成分が選択された三つの親個体のうち残りの一つの親個体と主軸との距離に比例することを特徴とする請求項25記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項28】 前記複数の個体の集団を格子点上に配置し、前記選択処理工程において、各個体と近傍の所定数の個体との間で地域的な小集団を形成し、地域的な小集団の中から少なくとも二つの親個体を選択することを特徴とする請求項24ないし請求項27記載の最適フィ

ッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項29】 前記置換処理工程において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、1種類の評価基準がより優れている個体を次世代集団の個体とすることを特徴とする請求項24ないし請求項28記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項30】 前記置換処理工程において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、2種類以上の評価基準の優越関係に基づいて次世代集団の個体を決定することを特徴とする請求項24ないし請求項28記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項31】 前記遺伝的アルゴリズムを用いて最適化したフィッティングパラメータに対して、局所的探索手法による最適化を行うことを特徴とする、請求項23ないし30に記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項32】 最適化手法によって測定データの組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、実験条件間の変化がなめらかになるようにフィッティング関数で該フィッティングパラメータをフィッティングし、実験条件毎の物理モデルの最適なフィッティングパラメータを総合的に決定する処理をコンピュータに実施させることを特徴とする請求項23ないし請求項30記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項33】 前記最適化手法は、局所的探索手法により行われることを特徴とする請求項32記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、物理量の測定により取得された離散的なデータに対し、複数のパラメータを有する物理モデルをなるべく一致させ、その最適なフィッティングパラメータを決定する方法および装置、並びに最適フィッティングパラメータ決定プログラムに関する。

【0002】

【従来の技術】物理現象を実験結果から解析し、その解析結果を用いてその物理現象を予測するということは、工学において頻繁に行われている。その場合、行われる手順としては、実験結果を説明する物理モデルを仮定し、その物理モデルのパラメータを実験結果(x_i, y_i)になるべく一致するようにフィッティング(fitting)させた物理モデルを決定する(図1参照)ことが行われている。一度、フィッティングパラメータを決定すれば、その物理モデルを用いて、実験を行わずにその物理現象を予測できる。

【0003】しかし、物理現象をなるべく高い精度で予測するためには、物理モデルのパラメータを精度良くフィッティングする必要がある。このために、従来は最小

二乗法を用いたフィッティングが行われてきた。例えば、特開平7-73207号公報では、あらかじめ定めた原子間ポテンシャル関数のパラメータを、実験結果に一致するように最小二乗法で決定する方法が提案されている。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】ところが近年、より精度良く物理現象を予測することが求められており、仮定する物理モデルがより複雑化し高度化している。そのため、フィッティングすべきパラメータの数が増加し、従来の最小二乗法を用いたのでは、計算に時間がかかる場合が多い。

【0005】また複雑な物理モデルのパラメータをフィッティングする場合、計算の初期パラメータの設定が重要となる。この初期パラメータの設定が悪い場合、収束に長時間を要したり、場合によってはまったく異なった解を得てしまう。これは、パラメータ空間において、パラメータ値が反復計算の途中でローカルミニマムに陥ってしまうからである。その結果、最適な初期値を求めるために、結局試行錯誤によらなければならない、多大な手間や時間を要するという問題があった。

【0006】さらに、最小二乗法を用いる場合は、その評価基準として、実験データと物理モデルから計算される予測データとの誤差の二乗和を用いている。しかし、物理モデルのパラメータを精度良くフィッティングしようとした場合、その二乗和を評価するだけでは不十分で、誤差の絶対値の最大値なども評価する必要がある。しかしながら、従来の最小二乗法では、誤差の二乗和以外は扱うことができなかった。

【0007】一方、遺伝的アルゴリズムは、確率的探索手法の一つであり、(1)大域的な探索において有効に作用し、(2)評価関数以外には微分値等の派生的な情報が必要でなく、(3)しかも容易な実装性を持つ、アルゴリズムである。このアルゴリズムは、フィッティングパラメータの最適化に適用可能であり、上記の問題を解決する可能性がある。しかし従来技術では、遺伝的アルゴリズム中で用いられる遺伝的操作が離散的なパラメータ値(2進数値)しか扱えないため、本来連続値である物理モデルのパラメータを離散化する必要があり、十分な精度を持つ解を実用的な時間で得ることが困難であった。

【0008】つまり、従来の離散的な遺伝的アルゴリズムでは、十分な精度の解を得ようとする場合、各パラメータの離散化の程度を細かくする必要があり、必然的に遺伝子情報が多くなるために、著しい計算時間の増加を招いてしまう。逆に、実用的な計算時間で解を得るために各パラメータを粗く離散化すれば、離散化の最小刻みの間に最適解が存在する場合、最適解に到達しない危険性があった。

【0009】さらに、従来の遺伝的アルゴリズムには、

初期収束という問題があった。これは、探索の初期の段階で比較的精度が良い解が発見されてしまうと、その解に似た個体が集団中をほとんど占めてしまい、その後探索が進まなくなってしまう問題である。フィッティングパラメータ最適化の問題は、多数のローカルミニマムをもつ可能性があるため、この初期収束が頻繁に起こり十分な精度の解を得られないという問題があった。

【0010】この初期収束の問題を回避するために、従来技術では、一般に遺伝的アルゴリズムの集団の個体数を増やすことが行われてきたが、計算量が増加し、最適解への収束が遅くなるという問題を生じた。

【0011】そこで本発明は、このような従来技術の有する未解決の課題に着目してなされたものであって、物理モデルのパラメータを効率的に精度良く最適にフィッティングすることを目的としている。

【0012】

【課題を解決するための手段】すなわち請求項1記載の発明は、複数のパラメータを有する物理モデルにおいて、物理量の測定により取得された離散的なデータ点に対する最適フィッティングパラメータを決定するために、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として前記パラメータを実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を用意して遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータを最適化することを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定方法である。このような発明によれば、染色体の情報を離散化する処理が不要となり、離散化の精度によって得られる解の精度及び計算時間が影響されるということがなくなる。

【0013】さらに、請求項2記載の発明は、請求項1記載の最適フィッティングパラメータ決定方法において、前記遺伝的アルゴリズムが、少なくとも二つの親個体を選択する選択処理工程と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成工程と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理工程とを、少なくとも備えることを特徴とする。このような発明によれば、局所的な最適解にとらわれることなく、極めて有効に探索を進めることができる。

【0014】請求項3記載の発明は、請求項2記載の最適フィッティングパラメータ決定方法において、子個体生成工程における交叉処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体おのおの実数ベクトル成分に基づいて設定されることを特徴とする。このような発明によれば、集団中の親同士の距離が離れている探索序盤では大域的に探索を行い、親同士の距離が近い探索終盤では局所的に探索を行うことができる。

【0015】請求項4記載の発明は、請求項2記載の最適フィッティングパラメータ決定方法において、子個体生成工程における突然変異処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のうち少なくとも一つの親個体に近づくに連れて生起確率が高くなることを特徴とする。このような発明によれば、突然変異処理において、有効に局所的な探索を行うことができる。

【0016】請求項5記載の発明は、請求項3記載の最適フィッティングパラメータ決定方法において、選択処理工程が、三つの親個体を選択し、前記生起確率分布は、前記選択された三つの親個体のうち二つの親個体の中点を中心とした正規分布であって、正規分布の標準偏差は、前記二つの親個体の実数ベクトルを結ぶ主軸方向の成分が前記二つの親個体の距離に比例し、それ以外の軸の成分が選択された三つの親個体のうち残りの一つの親個体と主軸との距離に比例することを特徴とする。このような発明によれば、交叉処理工程によって、個体集団の分布を保ちつつ集団中の親同士の距離が離れている探索序盤では大域的に探索を行い、親同士の距離が近い探索終盤では局所的に探索を行うことができる。

【0017】請求項6記載の発明は、請求項2ないし請求項5記載の最適フィッティングパラメータ決定方法において、複数の個体の集団を格子点上に配置し、前記選択処理工程において、各個体と近傍の所定数の個体との間で地域的な小集団を形成し、地域的な小集団の中から少なくとも二つの親個体を選択することを特徴とする。このような発明によれば、集団全体が一つの遺伝子型に急速に統一されるという初期収束をなくすることができる。

【0018】請求項7記載の発明は、請求項2ないし請求項6記載の最適フィッティングパラメータ決定方法において、置換処理工程が、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、1種類の評価基準がより優れている個体を次世代集団の個体とすることを特徴とする。このような発明によれば、複数の評価基準を1種類の評価基準に縮約することで計算時間を短縮できる。

【0019】請求項8記載の発明は、請求項2ないし請求項6記載の最適フィッティングパラメータ決定方法において、置換処理工程が、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、2種類以上の評価基準の優越関係に基づいて次世代集団の個体を決定することを特徴とする。このような発明によれば、各評価基準に適合する複数の最適解を基に総合的に判断した最適フィッティングパラメータを求めることができる。

【0020】請求項9記載の発明は、請求項1ないし8に記載の遺伝的アルゴリズムを用いて最適化したフィッティングパラメータに対して、局所的探索手法による最適化を行うことを特徴とする最適フィッティングパラメ

ータ決定方法である。このような発明によれば、探索の終盤における探索速度の低下を防止して、フィッティングパラメータの精度をより向上することができる。

【0021】請求項10記載の発明は、請求項1ないし請求項8記載の最適フィッティングパラメータ決定方法において、前記物理モデルは異なる実験条件毎に用意され、実験条件を段階的に変化させて測定データの組を複数用意し、最適化手法によって測定データの組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、該フィッティングパラメータを実験条件間の変化をなめらかにできるようにフィッティング関数でフィッティングされ、実験条件毎の物理モデルの最適なフィッティングパラメータを総合的に決定することを特徴とする。

【0022】請求項11項記載の発明は、請求項10記載の最適化手法を局所的探索手法により行うことを特徴とする。

【0023】更に、請求項12記載の発明は、複数のパラメータを有する物理モデルの最適なフィッティングパラメータを決定する装置であって、物理量の測定により取得された離散的なデータ点に対し、測定データと物理モデルから計算した予測値に基づいて適応度を算出する適応度算出手段と、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として前記パラメータを実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団に対して遺伝的アルゴリズムの遺伝的操作を行う遺伝的操作処理手段と、次世代個体集団が評価基準を満たすか否かを判断する判断手段とを備えた最適フィッティングパラメータ決定装置であって、次世代個体集団が評価基準を満たしたときの個体集団の中の高い適応度をもつ個体により、前記物理モデルの最適なフィッティングパラメータとすることを特徴とする。

【0024】請求項13記載の発明は、請求項12記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、遺伝的操作処理手段が少なくとも二つの親個体を選択する選択処理部と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成部と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理部と、を少なくとも備えたことを特徴とする。

【0025】請求項14記載の発明は、請求項13記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、子個体生成部における交叉処理が、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体おのおの実数ベクトル成分に基づいて設定することを特徴とする。

【0026】請求項15記載の発明は、請求項13記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、子

個体生成部における突然変異処理が、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布が前記選択された親個体のうち少なくとも一つの親個体に近付くに連れて生起確率を高くすることを特徴とする。

【0027】請求項16記載の発明は、請求項14記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、選択処理部が、三つの親個体を選択し、前記生起確率分布は、前記選択された三つの親個体のうち二つの親個体の中点を中心とした正規分布であって、正規分布の標準偏差は、前記二つの親個体の実数ベクトルを結ぶ主軸方向の成分が前記二つの親個体の距離に比例し、それ以外の軸の成分が選択された三つの親個体のうち残り一つの親個体と主軸との距離に比例することを特徴とする。

【0028】請求項17記載の発明は、請求項13ないし請求項14記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、複数の個体の集団を格子点上に個体を配置し、選択処理部が、各個体と近傍の所定数の個体との間で地域的な小集団を形成し、地域的な小集団の中から少なくとも二つの親個体を選択することを特徴とする。

【0029】請求項18記載の発明は、請求項13ないし請求項14記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、前記置換処理部において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、1種類の評価基準がより優れている個体を次世代集団の個体とすることを特徴とする。

【0030】請求項19記載の発明は、請求項13ないし請求項17記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、置換処理部が、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、2種類以上の評価基準の優越関係に基づいて次世代集団の個体を決定することを特徴とする。

【0031】請求項20記載の発明は、請求項12ないし請求項19記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、遺伝的アルゴリズムを用いて最適化したフィッティングパラメータに対して、局所的探索手法による最適化を行う処理手段を有することを特徴とする。

【0032】請求項21記載の発明は、請求項12ないし請求項19記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、段階的に変化した実験条件毎に用意された複数の測定データの組に対し、最適化手法によって測定データの組毎に最適なフィッティングパラメータを求める最適化手段と、該フィッティングパラメータを実験条件間の変化がなめらかにできるようにフィッティング関数でフィッティングするパラメータフィッティング処理手段を有し、前記適応度算出手段は前記パラメータフィッティング処理手段によって求めたフィッティングパラメータに基づいて適応度を算出することを特徴とする。

【0033】請求項22記載の発明は、請求項21記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、前

記最適化手段が局所的探索手法により最適化を行うことを特徴とする。

【0034】請求項23記載の発明は、複数のパラメータを有する物理モデルのパラメータを、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を、遺伝的アルゴリズムを用いて最適化することにより最適なフィッティングパラメータを得ることをコンピュータに実施させることを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定プログラムである。

【0035】請求項24記載の発明は、請求項23記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、遺伝的アルゴリズムが、少なくとも二つの親個体を選択する選択処理工程と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成工程と、物理モデルを計算し生成した子の適応度を計算する適応度計算工程と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、前記計算された適応度に基づき次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理工程とをコンピュータに実施させることを特徴とする。

【0036】請求項25記載の発明は、請求項24記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、子個体生成工程における交叉処理が、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のおのおの実数ベクトル成分に基づいて設定する工程であることを特徴とする。

【0037】請求項26記載の発明は、請求項24記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、子個体生成工程における前記突然変異処理が、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のうち少なくとも一つの親個体に近づくに連れて生起確率を高くする工程であることを特徴とする。

【0038】請求項27記載の発明は、請求項25記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、選択処理工程が、三つの親個体を選択し、前記生起確率分布が、前記選択された三つの親個体のうち二つの親個体の中点を中心とした正規分布であって、正規分布の標準偏差が、前記二つの親個体の実数ベクトルを結ぶ主軸方向の成分を前記二つの親個体の距離に比例させ、それ以外の軸の成分を選択された三つの親個体のうち残りの一つ親個体と主軸との距離に比例させる工程であることを特徴とする。

【0039】請求項28記載の発明は、請求項24ないし請求項27記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、複数の個体の集団を格子点上に配

置し、前記選択処理工程が、各個体と近傍の所定数の個体との間で地域的な小集団を形成し、地域的な小集団の中から少なくとも二つの親個体を選択することを特徴とする。

【0040】請求項29記載の発明は、請求項24ないし請求項28記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、置換処理工程が、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、1種類の評価基準がより優れている個体を次世代集団の個体とする工程であることを特徴とする。

【0041】請求項30記載の発明は、請求項24ないし請求項28記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、置換処理工程が、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、2種類以上の評価基準の優越関係に基づいて次世代集団の個体を決定する工程であることを特徴とする。

【0042】請求項31記載の発明は、請求項23ないし請求項30記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、遺伝的アルゴリズムを用いて最適化したフィッティングパラメータに対して、局所的探索手法による最適化を行う工程であることを特徴とする。

【0043】請求項32記載の発明は、請求項23ないし請求項30記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、最適化手法によって測定データの組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、実験条件間の変化がなめらかになるようにフィッティング関数で該フィッティングパラメータをフィッティングし、実験条件毎の物理モデルの最適なフィッティングパラメータを総合的に決定する処理をコンピュータに実施させることを特徴とする。

【0044】請求項33記載の発明は、請求項32記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、最適化手法が、局所的探索手法により行われることを特徴とする。

【0045】

【発明の実施の形態】以下に、本発明の実施の形態を実施例によって、添付図面を参照して説明する。図2は、本発明の第1実施例による、物理モデルの最適フィッティングパラメータを決定する方法のフロー図を示す。図2において、まずステップS1で、物理量の離散的な測定データの組を用意する。次のステップS2で、その測定データにフィッティングさせる物理モデルを仮定し、次のステップS3で、遺伝的アルゴリズムによってステップS2で仮定した物理モデルのパラメータを実験結果データにフィットするように最適化し、最後にステップS4で最終的な物理モデルのパラメータを決定する。

【0046】遺伝的アルゴリズムの参考文献としては、例えば、出版社ADDISON-WESLEY PUBLISHING COMPANY, INC. が1989年に出版した、David E. Goldberg 著の

「Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning」がある。

【0047】一般的な遺伝的アルゴリズムでは、まず遺伝子を持つ仮想的な生物の集団を設定し、あらかじめ定めた環境に適応している個体が、その適応度の高さに応じて生存し、子孫を残す確率が増えるようにする。そして、遺伝的操作と呼ばれる手順で親の遺伝子を子に継承させる。このような世代交代を実行し、遺伝子および生物集団を進化させることにより、高い適応度を持つ個体が生物集団の大勢を占めるようになる。そしてその際の遺伝的操作としては、実際の生物の生殖においても生じる、遺伝子の交叉、および突然変異等が用いられる。

【0048】図3は、遺伝的アルゴリズムの概略手順を説明するフロー図を示す。この手順では、初めのステップS11で、個体の染色体構造を決定する。すなわち、世代交代の際に親の個体から子孫の個体に、どのような内容のデータをどのような形式で伝えるかを定める。図4に染色体構造を例示する。ここでは、対象とする最適化問題の変数ベクトル x を、 n 個の記号 A_i ($i=1, 2, \dots, n$)の列で表わすことにし、これを n 個の遺伝子からなる染色体とみなす。図4中、 Ch は染色体、 G_s は遺伝子を表し、遺伝子 G_s の個数 n は5である。遺伝子の値 A_i としては、一般的に0および1の2値を用いる。図4の例では、 $a \sim e$ のアルファベットが遺伝子である。このようにして記号化された遺伝子の集合が個体の染色体である。

【0049】図3のステップS11では、次に各個体が環境にどの程度適応しているかを表わす適応度の計算方法をメモリから選択し、決定する。その際、対象とする最適化問題の評価関数の値がより高い変数あるいはより低い変数ほど、それに対応する個体の適応度が高くなるように設計する。またその後に行う世代交代では、適応度の高い個体ほど、生き残る確率あるいは子孫を作る確率が他の適応度の低い個体よりも高くなるようにする。逆に、適応度の低い個体は、環境にうまく適応していない個体とみなして、消滅させる。これは、進化論における自然淘汰の原理を反映したものである。すなわち適応度は、生存の可能性という面から見て各個体がどの程度優れているかを表わす尺度となる。

【0050】遺伝的アルゴリズムでは、探索開始時には、対象とする問題は一般に全くのブラックボックスであり、どのような個体が望ましいかはまったく不明である。このため通常、初期の生物集団は乱数を用いてランダムに個体を発生させている。従ってここにおける手順でも、ステップS12で処理を開始した後のステップS13では、初期の生物集団は乱数を用いてランダムに発生させる。なお、探索空間に対して何らかの予備知識がある場合は、評価値が高いと思われる部分を中心に生物集団を発生させるなどの処理を行うこともあ

る。ここで、発生させる個体の総数を、集団の個体数という。

【0051】次にステップS14で、生物集団中の各個体の適応度を、先にステップS11で決めた計算方法により計算する。各個体について適応度が求まったら、次にステップS15で、次世代の個体の基となる個体を集団から選択淘汰する。しかしながら選択淘汰を行うだけでは、現時点で最も高い適応度を持つ個体が生物集団中に占める割合が高くなるだけで、新しい探索点が生じないことになる。このため、次に述べる交叉と突然変異と呼ばれる操作を行う。

【0052】即ち、次のステップS16の処理では、選択淘汰によって生成された次世代の個体の中から、所定の発生頻度で二つの個体のペアをランダムに選択し、染色体を組み変えて子染色体を作る(交叉処理)。ここで、交叉が発生する確率を、交叉率と呼ぶ。交叉によって生成された子孫の個体は、親にあたる個体のそれぞれから形質を継承した個体である。この交叉処理によって、個体の染色体の多様性が高まり進化が生じる。

【0053】交叉処理後は、次のステップS17で、個体の遺伝子を一定の確率で変化させる(突然変異処理)。ここで、突然変異が発生する確率を突然変異率と呼ぶ。遺伝子の内容が低い確率で書き換えられるという現象は、実際の生物の遺伝子においても見られる現象である。ただし、突然変異率を大きくしすぎると、交叉処理による親の形質遺伝の特徴が失われ、探索空間中をランダムに探索することと同様になるので注意を要する。

【0054】以上の処理によって次世代の集団が決定され、次に、ステップS18で、生成された次世代の生物集団が探索を終了するための評価基準を満たしているか否かを調べる。この評価基準は、問題に依存するが、代表的なものとして次のようなものがある。

- ・生物集団中の最大の適応度が、あるしきい値より大きくなった。
- ・生物集団全体の平均の適応度が、あるしきい値より大きくなった。
- ・生物集団の適応度の増加率が、あるしきい値以下の世代が一定の期間以上続いた。
- ・世代交代の回数が、予め定めた回数に到達した。

【0055】上述の如き終了条件の何れかが満たされた場合は、ステップS19へ進んで探索を終了し、その時点での生物集団中で最も適応度の高い個体を、求める最適化問題の解とする。終了条件が満たされない場合は、ステップS14の各個体の適応度の計算の処理に戻って探索を続ける。このような世代交代の繰り返しによって、集団の個体数を一定に保ちつつ、個体の適応度を高めることが出来る。以上が一般的な遺伝的アルゴリズムの概略である。

【0056】上で述べた遺伝的アルゴリズムの枠組みは、実際のプログラミングの詳細を規定しない緩やかな

ものとなっており、個々の問題に対する詳細なアルゴリズムを規定するものではない。このため、遺伝的アルゴリズムを本発明の最適フィッティングパラメータの決定に際して、以下の項目を最適フィッティングパラメータ決定用の実現する必要がある。

- (a) 染色体の表現方法
- (b) 個体の評価関数
- (c) 選択淘汰方法
- (d) 交叉方法
- (e) 突然変異方法
- (f) 探索終了条件

【0057】(a) 染色体の表現方法：本実施例では、遺伝的アルゴリズムの染色体表現として、物理モデルのパラメータを実数ベクトルとして直接用いることを特徴としており、これにより、染色体の情報を離散化する処理を不要とし、離散化の精度によって得られる解の精度および計算時間が影響されるという問題点を解決できる。

【0058】このことを図5の遺伝子個体例を参照して、以下説明する。遺伝的アルゴリズムの染色体構造は物理モデルのパラメータ値 ($\alpha, \beta, \gamma, \theta, \varphi$) (パラメータ数 $n=5$) に一対一に対応させる。物理モデルのパラメータ値が (+2.31, -6.45, -3.28, +3.55, -4.12) であったとき、遺伝的アルゴリズムの染色体は (+2.31, -6.45, -3.28, +3.55, -4.12) となる。図5の例では、パラメータの個数 n は5個であるが、この個数は仮定した物理モデルによって異なる。

【0059】(b) 個体の評価関数：遺伝的アルゴリズムの個体の評価関数、つまり適応度は、例えば、実験結果の離散的な測定データと、染色体に記述されたパラメータによって定まる物理モデルから計算した予測値との差の平均二乗値を使用する。また、適応度評価は上記の差の平均二乗値ではなく、差の絶対値の最大値を用いてもよい。図6の例は、変数を x とする物理モデル $y = f(x)$ とし、6組の実験データ (x_1, y_1) ~ (x_6, y_6) から5個のフィッティングパラメータ ($\alpha, \beta, \gamma, \theta, \varphi$) を求める場合で、物理モデル環境に適した評価関数として図の例1、例2の2関数を使用できる例を示している。

【0060】このように定めた評価関数は、多数の局所的な最適解（ローカルミニマム）を持つ可能性がある。そのため、一般的な探索手法である山登り法やシンプレ

ックス法を用いたのでは、局所的な最適解に探索が捕われてしまい、その結果、精度の良いフィッティングパラメータを得ることができない。しかし、遺伝的アルゴリズムは、確率的な探索手法であり、かつ、複数の探索点を用いる並列探索手法であることから、局所的な最適解に捕われにくい特徴があり、本実施例の評価関数を使用することにより極めて有効に探索を進めることができる。

【0061】(d) 交叉方法：交叉は、従来の離散的な2進数値を扱う遺伝的アルゴリズムでは、染色体の遺伝子を部分的に入れ替える操作が行われている。しかしながら、2進数表現により定義される遺伝子型の空間は、実数値に変換後における実際のフィッティングパラメータの空間とは、位相構造が大きく異なる。たとえば、2進数上である1ビットが反転しても、変換後のパラメータは、反転したビットの位置によってその影響が異なる。最上位ビットが反転した場合、そのパラメータ値を大きく変化するが、最下位ビットが反転した場合は、パラメータ値はほとんど変化しない。

【0062】そのため、従来の遺伝子を部分的に入れ替える交叉方法では、パラメータ空間の連続性が考慮されていないために、親個体の獲得した形質が子個体に適切に継承されない。そのために、無駄な探索を繰り返したり、十分な探索が行われないなどの問題が生じ、効率良く最適化が行われない。そこで本発明では、フィッティングパラメータの連続性を考慮した、新しい交叉方法を考案した。

【0063】図7は本発明に使用する交叉処理の1例の概略フロー図を示す。まず、ステップS21において、個体集団から親個体3をランダムに選ぶ。つぎに、ステップS22において、図3のステップS15の選択によって選ばれた親個体1、親個体2のパラメータ空間での中点Cを計算する。そして、ステップS23において、その中点Cの周辺に設定された連続的な所定の生起分布、例えば正規分布確率に従って二つの子個体を生成する。具体的には、次の式(1)に従って子個体が発生する。連続的な生起分布としては、コーシー分布など他の微分可能な生起分布を用いてもよい。

【0064】

【数1】

$$X_k = X_c + \xi d + \sum_{i=1}^{n-1} \eta_i e_i D \dots \dots \dots (1)$$

ここで、

$$X_c = \frac{1}{2} (X_1 + X_2)$$

$$d = X_2 - X_1$$

【0065】ここで、 n はパラメータの個数（パラメータ空間の次元数）、 x_k は生成された子個体 k のパラメータ空間での座標、 x_c は中点 C の座標、 d は親個体1、親個体2を結ぶ直線（主軸と呼ぶ）のベクトル、 D は、主軸と親個体3の距離である。 e_i は、主軸に直交する部分空間（ $n-1$ 次元）を張る正規直交基底ベクトルである。 ξ は、正規分布 $N(0, \sigma_\xi^2)$ に従う乱数、 η_i は、正規分布 $N(0, \sigma_{\eta_i}^2)$ に従う独立な $n-1$ 個の乱数である。親個体3をランダムに2回選んで、式（1）の子個体生成を2回繰り返せば、親個体1、2から子個体 x_{k1} 、 x_{k2} が生成できる。

【0066】図8は、フィッティングパラメータが α 、 β 2個（2次元パラメータ空間）の場合における正規分布確率の標準偏差の求め方を示す。正規分布の標準偏差の主軸方向成分 σ_ξ は、両親の距離 $|d|$ に比例（ $\sigma_\xi = a |d|$ ）し、それに直交する軸成分 σ_{η_i} は主軸と親個体3の距離 D に比例（ $\sigma_{\eta_i} = b D$ ）するように設定される。

【0067】このような交叉方法（子個体生成方法）を用いることにより、フィッティングパラメータの連続性を陽に扱うことができる。陽に扱えるとは、パラメータ空間で近傍にある個体が、遺伝子空間でも近傍にあることを意味する。もしも遺伝子表現を従来手法の2進数表現を用いた場合、パラメータ空間で近傍にある個体が、遺伝子空間で必ずしも近傍にあるとは限らず、探索過程が初期、終盤いずれの場合も大域的な探索が行われてしまう。しかし、上記手法によれば集団中の親同士の距離が離れている探索序盤では大域的に探索を行い、親同士の距離が近い探索終盤では局所的に探索を行うことができる。

【0068】(e) 突然変異方法：突然変異は、従来の離散的な2進数値を扱う遺伝的アルゴリズムでは、染色体の遺伝子の一部を反転させる操作が行われている。しかし、この操作もフィッティングパラメータの連続性を考慮していないために、探索のいずれの過程においても大域的な探索と局所的な探索の両方を担当していた。そこで本実施例では、突然変異は、子個体の染色体の各遺伝子に正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従って発生させた正規乱数を加算する操作とした。これにより、突然変異は局所的な探索のみを担当することとなり、探索終盤で有効に

探索を行うことができる。

【0069】図9の染色体例で本実施例の突然変異法を説明すると、染色体Ch5が、

(+2.31 -6.45 -3.28 +3.55 -4.12)

であるとき、各遺伝子について正規分布に従い独立に発生させた乱数が、

(+0.12 -0.05 +0.02 -0.07 -0.09)

であるとき、これを染色体Ch5に加算して染色体Ch6

(+2.45 -6.50 -3.26 +3.48 -4.21)

に変更する。正規分布の標準偏差をあまり大きくすると探索がランダムサーチと同じになるので、予備実験により適切な値を決定する。なお、加算する乱数として、正規分布以外のコーシー分布などの他の分布を用いてもよい。

【0070】(c) 選択淘汰方法：遺伝的アルゴリズムの選択淘汰は、集団から次世代に残す個体を選択する処理である。本発明では、図10の処理フローに示すように、例えば集団からランダムに二つの親個体1、2を選び、これに対して交叉、突然変異を適用し子個体1、2を生成し、親個体1、親個体2、子個体1、子個体2の4個体の内、適応度の値が高い上位二つの個体A、Bを選択し（ステップS25）、集団内の親個体1、2を選択された個体A、Bに置換する（ステップS26）。この置換処理は、一般的な遺伝的アルゴリズムのように集団全部の個体を一斉に変化させない点が大きな特徴である。これにより、少ない集団の個体数で探索を行うことが可能になる。

【0071】(f) 探索終了条件：個体の適応度が所定の条件を満たしたときに探索は終了する。ここでは、例えば、集団中の最大の適応度が予め定めたいきい値を越えた場合とすればよい。

【0072】以上のように、染色体の表現方法、個体の適応度、交叉方法、突然変異方法、選択淘汰方法、探索終了条件を決め、遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータ最適化を行う第1実施例の処理を図11のフロー図により説明する。

【0073】先ず、ステップS31で遺伝的アルゴリズムの初期集団として、一様乱数を用いて個体を複数作成する。これにより、初期集団の各染色体における各遺伝

子の値は上限値と下限値のあいだのランダムな実数値をとることができる。但し、フィッティングパラメータの最適値の傾向について何らかの予備知識が存在する場合には、より適応度が高いと思われる個体を初期集団として作成するようにする。そして、初期集団それぞれの個体について適応度を計算し、選択、交叉、突然変異、置換を行って順次探索を行う。

【0074】について、ステップS32の個体の選択処理では、集団からランダムに二つの親個体1, 2を選び、これらに対して以下の遺伝的操作を行う。

【0075】ステップS33の交叉処理では、図7に示したように、選択によって選ばれた親個体1, 2およびランダムに選んだ親個体3から、子個体1, 2を生成する。なお、この交叉処理を確率（交叉確率） P_c で発生させる。

【0076】ステップS33の交叉に引き続いて実行するステップS34の突然変異は、子個体1, 2の染色体の遺伝子にガウス分布 $N(0, \sigma^2)$ に従って発生させた正規乱数を加算する処理を行って、染色体を変更する。なお、この突然変異処理が発生する確率を P_m とし、突然変異確率と呼ぶ。

【0077】そしてステップS34での突然変異処理が終了した後、得られた子個体1, 2の染色体の値（フィッティングパラメータ値）で、実際に物理モデルを計算し、子個体1, 2の適応度を計算する（ステップS35～S38）。こうして子個体1, 2の適応度が算出されると、次に、ステップS39において、図10に示した処理手順に従って個体の置換処理が行われる。すなわち、親個体1, 2と子個体1, 2の4個体のうち、適応度が高い上位二つの個体A, Bが選ばれ、ついで、集団内の親個体1, 2と個体A, Bを置換する。

【0078】上記の選択、交叉、突然変異、評価、置換の操作を繰り返し、ステップS40の判断で探索終了条件が満たされたときに、最適化処理は終了し、その時点での個体集団中で最も適応度の高い個体を遺伝的アルゴリズムで得られたフィッティングパラメータとする。なお、終了条件が満たされない場合は、ステップS32に戻って探索を続ける。

【0079】更に、一定回数繰り返しても探索終了条件を満たす染色体（フィッティングパラメータ値）が得られない場合には、ステップS41で現在の集団は初期収束をおこしていると判断され、再度初期集団の生成処理を行う。当然ながら、集団全部をつくり直さず、そのうちの50%の個体をランダムに新規に生成して入れ替えるようにしてもよく、また、やり直しをせずに、実験結果が物理モデルで説明できる範囲に収まっていないという警告を出して停止するようにしてもよい。

【0080】なお、遺伝的アルゴリズムは探索の終盤に、探索速度が落ちる場合がある。それは、大域的探索手法であるため、ある局所ピークに到達する速度では、

最急降下法などの勾配を用いる局所的探索手法にはかないためである。よって、探索時間を更に短縮するために、遺伝的アルゴリズムによってパラメータを最適化した後に、図2のステップS3の処理に局所的探索方法を組み合わせてもよい（第1実施例の変形例）。局所的探索手法としては、例えば、公知の最急降下法、ニュートン法、準ニュートン法（quasi-Newton Method）などを用いればよい。

【0081】上述したように、本実施例のフィッティングパラメータ最適化方法では、物理モデルのパラメータを遺伝的アルゴリズムの染色体として直接表現し、遺伝的アルゴリズムに従ってフィッティング誤差を最小とすようにフィッティングパラメータを最適探索する。従って、人手による初期パラメータを選ぶための試行錯誤を必要とすることなく、さらには局所的なピークにとらわれることなく短い計算時間で効率的に物理モデルのフィッティングパラメータを最適に決定することができる。これにより、対象とする物理現象の予測精度を向上させることが可能となる。

【0082】なお、上述の第1実施例では、探索手法として遺伝的アルゴリズムを用いた。しかしながら、遺伝的アルゴリズムにおける適応度において、局所的な最適解の個数が少ない場合には、焼きなまし法とよばれるアルゴリズムを遺伝的アルゴリズムの代わりに用いることができる。また、局所的な最適解の個数が多い場合でも、遺伝的アルゴリズムと比較して最適化の結果得られる性能は低下するが高速に探索することができる。

【0083】焼きなまし法の詳細は、例えば、JOHN WILEY & SONSが1989年に出版した、E. Aarts and J. Korst 著の「Simulated Annealing and Boltzmann Machines」を参照されたい。焼きなまし法は、山登り法の一つであり、温度と呼ばれる制御パラメータによって、局所的な最適解に探索が捕らわれないような工夫を加えたものである。

【0084】次に、本実施例の別の変形例を図12、図13を参照して説明する。物理モデルのフィッティングパラメータ最適化問題は、多数のローカルミニマムをもつ可能性があるため、初期収束が頻繁におこり十分な精度の解を得られない場合がある。そこで、集団内の遺伝子型の多様性をもつために、集団の中で遺伝的操作によって変化する個体の範囲（交叉において親が選ばれる範囲）を制限することを考案した。具体的には図11のステップS31において、集団の全ての個体を多次元の格子点上に配置し、各個体と近傍の一定数の個体との間で地域的な小集団を形成するようにする。なお、格子点の次元数と近傍の個体数はパラメータ数とは無関係に選ぶことができるが、数値実験の結果次元数が2または3、近傍の個体数は4ないし8が好適であった。図10は、2次元格子を示し、近傍の個体を8個体とした場合であ

る。なお、 n 次元格子は、対称にするために端をトーラスをなすように互いに結合している。

【0085】遺伝的操作は、この地域的な小集団ごとに、局所的に行う。つまり、図11のステップS32において、図13に示すフロー図の選択処理を行う。まず、ステップS50において、全ての格子点から1点をランダムに選び、つぎにステップS51において、ステップS50で格子点を中心に、近傍の個体とともに地域的な小集団を形成する。そして、ステップS52において、小集団内でランダムに親個体1, 2を選択する。

【0086】以上のような処理によって、探索の途中で集団中のある個体の適応度が極端に高い場合でも、その個体が交叉において親に選ばれるケースが限定され、また交叉によってその個体に似た子個体が発生した場合であっても子個体が小集団内に配置されるために、その個体の影響は小集団の重なりを通して徐々にしか全体に波及しない。そのため、集団全体がひとつの遺伝子型に急速に統一されてしまう初期収束の問題が起これにくくなり、遺伝子型の多様性を保つことができる。

【0087】また、一つの個体に一つのプロセッサを割り当てることによって、フィッティングパラメータ最適化装置として、並列計算機を用いることができる。その場合、格子の次元数および近傍の個体数は、並列計算機のプロセッサのトポロジに応じて定められる。

【0088】本発明の応用例として、分子動力学法を利

用した材料設計システムがある。分子動力学法は、物質を構成している各原子の運動を時時刻刻と古典的に解析する方法であり、このシミュレーションによって、材料の力学的性質や構造安定性、ある条件下における物質の動的挙動に関して分子・原子レベルから検討できる。分子動力学法を行うにあたって重要となるのは、物性に大きく影響する原子間ポテンシャルを事前に決めておくなくてはならないという点である。

【0089】つまり、原子間ポテンシャルを記述する近似的な関数形をあらかじめ仮定しておき、その関数に含まれるポテンシャルパラメータを適切な実験データとのフィッティングにより決定する。特に複雑な原子配置やアモルファス構造や安定構造から大きく歪んだ状態でのポテンシャル関数は、複雑になり、決定すべき未知のパラメータが増えるために、一般的な最小二乗法では収束しない場合が多い。そこで本発明の最適化方法を用いて、パラメータを最適化フィッティングすることにより、材料設計システムの精度と作業効率を高めることができる。たとえば、アモルファス構造をも再現する炭素原子のポテンシャル関数について本発明を適用する場合を考える。仮定する物理モデル関数は次の式(2)で表される。

【0090】

【数2】

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N f_c(r_{ij}) [a_{ij} f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \cdots \cdots (2)$$

ここで

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}), \quad f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij})$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{\pi (r_{ij} - R_{ij})}{(S_{ij} - R_{ij})} \right], & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0, & r_{ij} > S_{ij} \end{cases}$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \beta_i^{a_i} \zeta_{ij}^{a_i})^{-1/2a_i},$$

$$\zeta_{ij}^{a_i} = \sum_{k(\neq i, j)} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[\gamma^3 (r_{ij} - r_{ik})^3],$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + c_i^2/d_i^2 - c_i^2 / [d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2]$$

$$a_{ij} = (1 + \alpha_i^{a_i} \eta_{ij}^{a_i})^{-1/2a_i},$$

$$\eta_{ij} = \sum_{k(\neq i, j)} f_c(r_{ik}) \exp[\gamma^3 (r_{ij} - r_{ik})^3]$$

【0091】式(2)において、 r_{ij} は i j 結合の距離、 N が原子数、 f_R 、 a_{ij} 、 η_{ij} は反発力に関する変数、 f_A 、 b_{ij} 、 ζ_{ij} は引力に関する変数で、

b_{ij} は多体効果の影響が含まれている。また、 $f_c(r)$ は相互作用の打ち切り関数(カットオフ)、 θ_{ijk} は i j 結合と i k 結合の間の結合角であり、 R 、 S はカ

ットオフに関するパラメータ、 A , B , λ , μ , γ , β , n , c , d , h , χ はその他のパラメータである。 χ は同種原子の場合1であり、ポテンシャル関数を簡単にするため $a_i=0$, $\mu=\gamma$ としたので、未知のパラメータは9つとなる。これら未知パラメータをなるべく実験結果に一致するようにフィッティングし、いかに精度良くポテンシャル関数を設定するかが、材料設計システムでは重要になる。

【0092】実験データとしては、公知の物理実験方法を用いて、 r_{ij} , θ_{ijk} とポテンシャルの関係が複数組求まる。これら9つのパラメータを遺伝的アルゴリズムの染色体として表現し、実験データと予測結果の平均二乗誤差が最小となるように最適化する。その結果、ダイヤモンド結晶やアモルファス構造に関して、従来手法に比較して精度よくポテンシャル関数を決定することができる。

$$\frac{df(s)}{ds} = \frac{(s-a)f(s)}{b_0 + b_1s + b_2s^2} \quad \dots\dots (3)$$

$$\text{ここで} \quad s = x - R_p$$

$$\begin{cases} a = -\gamma\sigma_p(\beta + 3)/A \\ b_0 = -\sigma^2(4\beta - 3\gamma^2)/A \\ b_1 = a \\ b_2 = -(2\beta - 3\gamma^2 - 6)/A \end{cases}$$

$$\text{ここで} \quad A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$$

$$\ln \left[\frac{f(s)}{f_0} \right] = \frac{1}{2b_2} \ln(b_0 + b_1s + b_2s^2) - \frac{b_1/b_2 + 2b_1}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} \tan^{-1} \left(\frac{2b_2s + b_1}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} \right)$$

【0096】実験例に対するフィッティング最適化計算では、フィッティングパラメータ R_p , σ_p , γ , β の値を順番に並べたものを遺伝的アルゴリズムの染色体とした(パラメータ数 $n=4$)。フィッティングパラメータの初期値は、 $R_p: 0.0 \sim 2.0$, $\sigma_p: 0.0 \sim 0.25$, $\gamma: -1.0 \sim 1.0$, $\beta: 0.0 \sim 50.0$ の範囲に設定した。遺伝的アルゴリズムの評価関数は、実測データ値とフィッティングしたPearson I V分布関数値との平均二乗誤差を用いた。なお、誤差

【0093】次に、単結晶Si基板にB⁺を注入した場合のB⁺濃度分布(イオン注入分布、個/cm⁻³)の測定結果に対して本発明の第1の実施例における別の変形例の最適フィッティングパラメータ決定方法を使用して物理モデルのパラメータをフィッティング決定した実験結果を図16、図17について説明する。

【0094】B⁺濃度分布の実測データとして、ドーズ量(注入量)が $1e+15$ (個/cm⁻²)(ここで、 $1e+15$ は $10+15$ を表す。)のときに、加速エネルギーが $100\text{keV} \sim 1\text{MeV}$ 間における 100keV 間隔の10組の濃度分布を得た。その実測データに対して、次の式(3)のPearson I V分布関数をフィッティングすべき物理モデルと仮定した。

【0095】

【数3】

を計算する際には、濃度値の代わりに濃度値の常用対数値を用いた。また、分布の中心値から $\pm 20\%$ の範囲では、誤差に10倍の重み付けをして評価した。制約条件は、Pearson I V分布が成立するために式(3)中の $b_1^2 - 4b_0b_2 < 0$, $b_2 < 0$ とし、もしこの条件を満たさない場合には、評価関数値を ∞ とした。

【0097】遺伝的アルゴリズムの個体集団における格子の次元数は2、近傍の個体は8個体とし、集団の個体数は25(5×5)とした。評価関数を2500回評価

した時点（探索終了条件）で探索を打ち切り、最終世代において得られた最優秀個体に対して、準ニュートン法を用いた最適化を行い、最終的な解とした。

【0098】図16、図17は、上記実験におけるフィッティング最適化計算の実験結果を示す。図中、横軸は基板表面からの深さ（ μm ）、縦軸は濃度（常用対数目盛、単位は個/ cm^{-3} ）、破線は濃度の実測データを表す。実線は本実施例における変形例の最適化計算によって求められた物理モデルのフィッティング曲線を示す。図16は、実験条件がB⁺の加速エネルギーが100keVの場合、図17は実験条件が加速エネルギー1MeVの場合である。図16、図17より、物理モデルのフィッティング曲線が実験データに対してなめらかにフィッティングされていることが分かり、本発明による最適フィッティング決定方法の有効性が確認できた。

【0099】次に本発明の第2実施例について説明する。フィッティングの評価基準として、一般には実験データと物理モデルから計算される予測データとの誤差の平均二乗和を用いる。しかし、例えば一点において極端な誤差を有していても、誤差の平均二乗和評価では誤差が小さくなって評価される場合、精度良くフィッティングしようとするには、その平均二乗和だけで評価するのでは不十分で、誤差の絶対値の最大値などでも評価する必要がある。

【0100】これらの複数の評価基準を同時に最適化しようとする場合、従来の遺伝的アルゴリズムでは、複数の評価基準の重みつき和をとって一つの目的関数にして、その目的関数を適応度として最適化している。その結果得られる解は、重み係数に大きく依存することになる。しかし、予め設定した重み係数が妥当であったかどうかは、複数の評価基準おのおのの重み係数を変更しながら様々な最適解を得て初めて確認できるものである。したがって、満足できるフィッティングパラメータを得るために試行錯誤を繰り返す必要がある。

【0101】そこでこの問題を解決するために、複数の評価基準を重み付けすることなく、それぞれの評価基準に適合する解（パレート最適解）を遺伝的アルゴリズムを用いて直接的に求める手法を発明した。本発明の第2実施例の処理を図14のフロー図により説明する。

【0102】図14は、フィッティングパラメータの多目的最適化処理、即ち複数の評価基準を使用して最適化処理を行う処理フローを示している。ステップS60、

ステップS61ないしS63の処理工程において、図11の処理フローのステップS31、ステップS32とそれぞれ相違している。まず、ステップS60において遺伝的アルゴリズムの初期個体を乱数を利用して生成し、図12に示すようにすべての格子点に配置する。次にステップS61において、ランダムに選ばれた格子点に存在する個体と、それを中心とした近傍の個体からなる地域的な小集団を一時的に形成する。

【0103】次にステップS62において、形成された小集団の中で、中心個体より「劣る」個体を調べ、その数だけの子個体を発生させる。ただし、すべての近傍の個体が中心個体に優越している場合でも、新しい子個体を作らず。なお「劣る」という表現は、ある個体が他の個体と比べてすべての評価基準において劣っていることを表し、「優越する」という表現は、すべての評価基準において優れていることを表す。

【0104】次にステップS63およびS64において、ステップS62によって決められた個数の子個体が、図8に示す交叉によって生成され、その際に突然変異も発生する。ステップS64の交叉における一方の親は中心に存在する個体であり、残りの親は近傍に存在する個体からランダムに選ばれる。交叉によって子個体が生成されると、物理モデルを計算しその子個体の複数基準の評価値が計算される。

【0105】ステップS65において子個体の適応度を評価基準、例えば平均二乗誤差の計算によって計算する。次にステップS66において、生成された子個体と小集団内からランダムに選ばれた一親（個体Eとよぶ）との優越関係によって、置換処理を行うか否かを決定する。その置換処理を図15のフロー図により説明する。図15のステップS71において、子個体が個体Eに優越していた場合には、子個体と個体Eを置換する（ステップS72）。逆に、ステップS73において個体Eが子個体に優越していた場合は、置換は行わない。

【0106】そのどちらでもない場合は、シェアリングとよばれる手法によって置換を行うか否かを決定する。シェアリング置換は、具体的には、ステップS74において個体Eおよび子個体の小集団内におけるニッチ数の計算値を基に行う。ニッチ数 n_G は次の式（4）によって計算される。

【0107】

【数4】

$$n_G = \sum_{H \in P} S(d(G, H)) \quad \dots \dots \dots (4)$$

ここで、

$$S(d) = \begin{cases} 1 - d/\sigma & (0 \leq d \leq \sigma) \\ 0 & (d > \sigma) \end{cases}$$

【0108】式(4)において、Pは小集団の全個体を表し、 $d(G, H)$ は、個体GおよびHのパラメータ空間でのユークリッド距離を表す。また、 σ はあらかじめ与えられる定数で、この値以上に離れている個体同士は、全く似てない個体とみなされる。式(4)によって計算される n_G は、ある個体に似た個体が小集団にどれくらい存在するかを示す指標である。

【0109】そこで、ステップS75において、子個体と個体Eのニッチ数を比較して、個体Eのニッチ数が子個体のニッチ数よりも大きい場合は、ステップS76において個体Eと子個体を置換する。

【0110】以上の処理によりステップS66の置換処理が終了し、ステップS63からステップS66までをステップS62で決定された子個体の数だけ繰り返す。そして、ステップS67の判断で探索終了条件が満たされたときに、最適化処理は終了する。そして、ステップS4において、ユーザーが探索の結果得られたパレート最適解のなかから最も適したフィッティングパラメータを選択肢、それを物理モデルのパラメータとする。なお、ステップS67で終了条件が満たされない場合は、ステップS61に戻って探索を続ける。

【0111】更に、一定回数繰り返しても探索終了条件を満たす染色体(フィッティングパラメータ値)が得られない場合には、ステップS68で現在の集団は初期収束をおこしていると判断され、再度初期集団の生成処理を行う。当然ながら、集団全部を生成し直さず、そのうちの50%の個体をランダムに新規に生成して入れ替えるようにしてもよく、また、やり直しをせずに、実験結果が物理モデルで説明できる範囲に収まっていないという警告を出して停止するようにしてもよい。

【0112】上述の本発明の第2実施例では、フィッティングの評価基準を複数用い、それらを重み係数によって単一化するのではなく、遺伝的アルゴリズムをもちいて複数のパレート最適解を直接探索する。従って、人手により重み係数を選ぶための試行錯誤を必要とすることなく、いくつかの評価基準において最適である物理モデルのフィッティングパラメータを短い計算時間で同時に発見することができる。

【0113】次に本発明の第3実施例について説明する。本発明の第1実施例、第2実施例では、フィッティ

ングすべき測定データの組(単一実験条件での結果)一組でフィッティングパラメータを決定した。しかし、実際の測定では、ある実験条件を何段階かに変化させて、その段階ごとに測定データの組を取得する場合が多い。その場合は、測定データの組が複数になる。B+注入実験(図16、図17)では、実験条件のひとつである加速エネルギーを10段階に変化させて、10組の測定データを取得した。

【0114】このように測定データの組が複数になる場合は、それぞれの測定データごとに独立にフィッティングパラメータを決定する場合が多い。(第1実施例、第2実施例がこの場合に該当する。)その場合、決定したフィッティングパラメータと変化させた実験条件の関係をプロットすると、なめらかに変化しない場合が生じる。図18から図21に、上記実験結果例における、加速エネルギー値(実験条件)とフィッティングパラメータの関係を図示する。図18～図21より、フィッティングパラメータ R_p 、 σ_p は、加速エネルギーEに対してある程度なめらかに変化しているが、フィッティングパラメータ γ 、 β はなめらかに変化していないことが分かる。

【0115】図20、図21のようにフィッティングパラメータがなめらかに変化しない場合、物理モデルを求めようとするときに問題が生じる。物理モデルの計算時には、実験を行っていない実験条件では、既に実験して得られたフィッティングパラメータ間の補間を行ってパラメータを求める。例えば、上記実験では、加速エネルギーが150keVの場合の実験を行っていない。

【0116】その場合、既に実験を行った加速エネルギーが100keVと200keVである場合の測定データにより得られたフィッティングパラメータの平均をとることでフィッティングパラメータは近似されることになる。このため、決定されたフィッティングパラメータが実験条件に対してなめらかに変化していない場合には、補間したパラメータは急激に変化してしまい、物理モデルによる有効なシミュレーションを行うことができなくなる。

【0117】この問題を解決するために、本発明の第3実施例は、測定データを基に得られた実験条件間のフィッティングパラメータをなめらかに変動するようにパラ

メータをフィッティングする、総合的に最適なフィッティングパラメータを決定する方法である。

【0118】図22は、本発明の第3実施例による、物理モデルの最適フィッティングパラメータを決定する処理方法のフロー図を示す。第3実施例はステップS80、ステップS82、S83の処理を行う点で第1実施例、第2実施例と相違する。ステップS82A、S82Bの処理は図11のステップS35～S38に相当する。第1実施例の先ず、ステップS80で、物理量の離散的な測定データの組を、実験条件を段階的に変化させて複数用意する。

【0119】次のステップS81で、その測定データにフィッティングさせる物理モデルを仮定し、次のステップS82において後述する遺伝的アルゴリズムの手法によってステップS82Aで仮定した物理モデルのパラメータを実験条件毎の測定データ組に対して最適化し、更にステップS82Bで実験条件間のフィッティングパラメータの変化をなめらかにするように総合的に最適フィッティングし、最後にステップS83で最終的な物理モデルのパラメータを決定する。

【0120】次に本第3実施例で用いる遺伝的アルゴリズムの手法について説明する。この遺伝的アルゴリズムでは、複数のパラメータを同時に決定するために生じるステップS82における計算時間の増大を回避するために、ステップS82で公知の局所的探索手法を併用する。ステップS82で、計算時間が増大しない場合には、局所的探索手法を併用する必要はない。

【0121】また、実験条件間のフィッティングパラメータのなめらかさを定量的に評価するために、ステップS82Bで、実験条件間のフィッティングパラメータをなめらかな関数（フィッティング関数）で更にフィッティングし、その結果を遺伝的アルゴリズムでの評価関数（適応度）計算で用いる。

【0122】以下、本発明の第3実施例を詳細に説明する。

(a)染色体の表現方法：本実施例では、遺伝的アルゴリズムの染色体表現としてそれぞれの実験条件における物理モデルのパラメータを直列に並べたものを用いる。これを図23の例を参照して説明する。遺伝的アルゴリズムの染色体構造は実験条件 j ($j = 1, \dots, m$) に対する物理モデルのパラメータ値 ($\alpha_j, \beta_j, \gamma_j, \theta_j, \varphi_j$) に一対一に対応させる。

【0123】図23の例では実験条件1における物理モデルのパラメータ値が (+2.31, -6.45, -3.28, +3.55, -4.12) であったとき、遺伝的アルゴリズムの実験条件1に対応する染色体は (+2.31, -6.45, -3.28, +3.55, -4.12) となる。図23の例では、パラメータの個数すなわち遺伝子の個数は $5 \times m$ 個であるがこの個数は仮定した物理モデルのパラメータ個数によって異なる。B+注入実験に適用した場合では、パラメータの個数は $4 \times$

$10 = 40$ 個となる。

【0124】(c) 選択淘汰方法：選択淘汰方法は、第1実施例で示した方法を用いる。

(d) 交叉方法：交叉方法は、第1実施例で示した方法を用いる。

(e) 突然変異方法：突然変異方法は、すべての遺伝子に対して、確率 P_m で、遺伝子の値を乱数で初期化する方法を用いる。

(f) 探索終了条件：個体の適応度が所定の条件を満たしたときに探索は終了する。ここでは、例えば、集団中の最大の適応度があらかじめ定めたいきい値を越えた場合とすればよい。

【0125】(b) 個体の評価関数：遺伝的アルゴリズムの個体の評価関数つまりは適応度としては、実験条件毎に計算した平均二乗誤差（図6の例1）を、すべての実験条件で加算した値を用いる。ただし、平均二乗誤差を計算する前に、それぞれの実験条件において、計算時間を短縮するために局所的探索手法を用いてフィッティングパラメータの最適化を行う。局所的探索手法の初期値（探索開始点）は、染色体で規定されている値を用いる。

【0126】局所的探索手法としては、準ニュートン法を用いればよい。またそれ以外に、公知の最急降下法やパウエル法などの手法を用いてもよい。この操作によって、局所的な最適化は公知の手法が担当し、公知の手法の初期値を遺伝的アルゴリズムで大域的に最適化する、というそれぞれの手法が最も得意な部分で分担ができるので、パラメータ数増加に伴う計算時間の増加を抑えることができる。

【0127】局所的な最適化とは、ローカルミニマムの値を精度よく求めることを意味し、大域的な最適化とは、ローカルミニマムが探索空間中に複数存在する場合、ひとつのローカルミニマムに捕らわれないために、なるべく多くの部分空間で探索を行うことを意味する。この意味において、第1実施例および第2実施例の場合では、局所的な最適化および大域的な最適化をいずれも遺伝的アルゴリズムが担当する。本発明による遺伝的アルゴリズムでは、個体の集団内での交叉が探索の初期に大域的な最適化を行い、探索の終盤で局所的な最適化を行う。

【0128】しかし交叉および突然変異の処理ステップは、勾配情報を用いずに乱数的に探索を行う操作であるので、最適化すべきパラメータが増大した場合、精度よく局所的な最適化をするためには計算時間が非常にかかる。そこで第3実施例では、局所的な最適化に公知の局所的探索手法を用いて計算時間を短縮する。

【0129】上述した実施例3における(b)で定めた評価関数では、実験条件間のフィッティングパラメータのなめらかさをまだ定量的に評価（検出）することができない。図24は遺伝的アルゴリズムの個体の評価処理

を行う処理フローで、図22のステップS82A, S82Bの処理を行うフロー図であって、上記なめらかさを考慮して個体の適応度を計算する。突然変異処理と置換処理との間の処理を行う工程である。まず、ステップS90 (S90-1~S90-m) において、上述したように、準ニュートン法によりm通りの実験条件におけるn個のフィッティングパラメータをそれぞれ独立に評価することにより最適化する。つぎにステップS91において、求めたフィッティングパラメータを、変化した実験条件の値を引数とするなめらかな関数(フィッティング関数)でパラメータ毎に独立にフィッティングする。

【0130】B+注入実験(図16, 図17)では、変化した実験条件は加速エネルギーの値Eである。なめらかな関数として、例えば、次の式(5)の関数を用い

$$G_i(E) = q_i E^{r_i} + s_i \dots \dots (5)$$

【0133】次に、ステップS92 (S92-1~S92-n) において、ステップS91において求めたなめらかな関数(フィッティング関数)を用いて、各実験条件における物理モデルのフィッティングパラメータを計算し、その値を用いて実測データに対する平均二乗誤差を再計算する。

【0134】図25はその詳細なフロー図である。先ずステップS100 (S100-1ないしS100-n) において、実験条件jにおける物理モデルのフィッティングパラメータの値を、ステップS91において求めたフィッティング関数を用いてパラメータ毎に求める。B+注入実験の場合、例えば実験条件1においては、加速エネルギーが100KeVであるので、E=100を式(5)に代入し、ステップS91で求めた q_i, r_i, s_i を用いてパラメータ $R_p, \sigma_p, \gamma, \beta$ をそれぞれ求める。

【0135】次に、ステップS101では、ステップS100 (S100-1~S100-n) で計算したフィッティングパラメータによって実験条件jにおける物理モデルを確定し、その物理モデルを使用して実験条件jでの実験のシミュレーションをする。例えば、B+注入実験での実験条件1の場合、加速エネルギーが100KeVの場合のB+注入濃度分布をシミュレーションする。

【0136】最後にステップS102において、ステップS101での実験のシミュレーション結果と、実際の実験条件jでの実測データとの誤差を計算し、最終的な実験条件jにおける平均二乗誤差を求める。例えば、B+注入実験における実験条件1の場合、図16に破線で示した実測データとシミュレーション結果との平均二乗誤差を求める。

【0137】ステップS92においては、上記ステップ

ることができる。このなめらかな関数をフィッティングする方法としては、第1実施例または第2実施例の方法を用いてもよいし、計算時間が短縮できる準ニュートン法を用いてもよい。

【0131】B+注入実験の場合、加速エネルギーEを引数とし、ステップS90で求める10(実験条件数)×4(パラメータ数)=40個のフィッティングパラメータ値を、パラメータ毎($R_p, \sigma_p, \gamma, \beta$)に独立に10個のデータに対してフィッティングする。そのフィッティングの結果、それぞれのパラメータ毎に次の(5)式のフィッティングパラメータ q_i, r_i, s_i が4組求まることになる。

【0132】

【数5】

S100~ステップS102を実験条件毎に実行し、それぞれの実験条件における平均二乗誤差を求める。最後に、ステップS93において、ステップS92 (S92-1~S92-m) において求めた各実験条件での平均二乗誤差を加算し、総合的な遺伝的アルゴリズムの個体の適応度とする。なお、平均二乗誤差を加算するときに、重視すべき実験条件がある場合は、その実験条件に重み付けをして加算してやればよい。

【0138】以上のパラメータのフィッティング最適化方法によると、図20, 図21に例示したような、なめらかでないデータをなめらかな関数でフィッティングした場合、ステップS101の再計算で確定するフィッティングパラメータが、ステップS90において各実験条件で独立に求めた値から大幅にずれることになり、ステップS92での最終的な平均二乗誤差が増大する。それによって、実験条件間のフィッティングパラメータのなめらかさを定量的に検出できる。

【0139】以上のように、染色体の表現方法、個体の適応度、交叉方法、突然変異方法、選択淘汰方法、探索終了条件を決め、遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータの総合的な最適化を行う。処理フローは、図22のステップS82の部分で、図11の第1実施例とほぼ同様の処理をすればよい。図11の第1実施例と相違する部分について以下説明する。

【0140】先ず、図11のステップS35~S38の処理は、図24の評価処理をそれぞれ用いればよい。また、ステップS34の突然変異処理は、上記(e)で説明した方法を用いればよい。ステップS40で最適化処理が終了した後、図22のステップS83では、その時点での個体集団中で最も適応度が高い個体の、ステップS100 (ステップS-1ないしS100-n) で求めたフィッティングパラメータ群を遺伝的アルゴリズムで

得られたフィッティングパラメータとする。また、実測しなかった実験条件に対する物理モデルのフィッティングパラメータも、ステップS91において求めたなめらかな関数を用いて簡単に計算することができる。

【0141】以下に、B+注入実験結果のデータに対して、本実施例による遺伝的アルゴリズムを用いた最適フィッティングパラメータ決定方法を適用した場合の計算結果を示す。

【0142】仮定した物理モデルや、制約条件、実験条件は第1実施例と同一である。実験の結果得たフィッティングパラメータを図26～図29に示す。図18～図21の実験結果と比較して、加速エネルギーに対してなめらかにパラメータがフィッティング最適化できていることがわかる。実測データに対する最適な物理モデルのフィッティング結果は、図16、図17とほぼ同様にきれいにフィッティングできていた。この実験により、第3実施例の最適化方法の有効性が確認できた。

【0143】上述したように、本実施例のフィッティングパラメータ最適化方法では、実験条件が複数存在する場合においても、実験条件間のフィッティングパラメータのなめらかさを考慮した上で、総合的に最適な物理モデルのフィッティングパラメータを求めることができる。従って、なめらかなフィッティングパラメータを得るための人手による試行錯誤を必要とすることなく短い計算時間で効率的に物理モデルのフィッティングパラメータを最適化することができる。これにより、最適化した物理モデルをTCAD (Technology CAD)等の設計ツールで使うことができる。

【0144】本発明は、第1実施例～第3実施例の方法を実施する最適フィッティングパラメータ決定装置を提供する。図30は、第1実施例および第2実施例の最適フィッティングパラメータ決定装置を実施する最適フィッティングパラメータ決定装置の機能的ブロック図を示す。フィッティングパラメータ最適化装置10は、個体の適応度を算出する適応度算出手段11、個体集団の中から個体を選択し、交叉、突然変異、置換等の遺伝的操作を行う遺伝的操作処理手段12、個体集団が探索終了条件を満たすか否かの評価を行う評価手段13、メモリ14、入出力手段15を有している。これらの適応度算出手段11、遺伝的操作処理手段12、評価手段13は、各々独立したCPUで構成されてもよいし、ひとつのCPUを時分割で使うことにより構成してもよい。

【0145】CPUは、メモリ14の所定領域に格納されている所定のプログラムを起動させ、そのプログラムに従って各処理工程を実行する。メモリ14には、遺伝的アルゴリズムの個体の情報（染色体、適応度）および計測した実験データも格納される。物理モデル計算装置16は、メモリ16M、CPUを有し、メモリ16Mの所定領域に格納されている所定のプログラムに従って、

物理モデルを計算し、その結果を出力する。

【0146】物理モデル計算装置16はフィッティングパラメータ最適化装置10に含まれてもよい。その場合は、図31に示すように、フィッティングパラメータ最適化装置10は適応度算出手段11、遺伝的操作処理手段12、評価手段13、メモリ14、物理モデル計算手段17とを含み、適応度算出手段11、遺伝的操作処理手段12、評価手段13はメモリ14と物理モデル計算手段17とを共有する。

【0147】最適化処理においては、まず入出力手段15内のキーボードなどから、実験データを予測するため物理モデルが選定され、その情報が物理モデル計算装置16に与えられる。また、遺伝的アルゴリズムにおける、集団の個体数、交叉確率、突然変異確率などの定数も入力手段15からフィッティングパラメータ最適化装置10に与えられ、メモリ14の所定領域に記憶される。その後、メモリ14の所定領域に格納されている所定のプログラムに従って、CPUが処理を開始する。

【0148】適応度算出手段11では、物理モデル計算装置16に、実験データを与えたのち、物理モデル計算を開始させるための信号を送る。物理モデル計算装置16で物理モデルの計算が終了したのち、その計算結果（シミュレーション結果）データがフィッティングパラメータ最適化装置10に渡される。そのデータを用いて、適応度算出手段11で適応度が計算されメモリ14に格納される。遺伝的操作処理手段12では、11で定まった適応度を用いて、各種遺伝的操作を行い、その結果をメモリ14に格納する。評価手段13は、遺伝的アルゴリズムの終了条件を計算し、それが満たされた場合には、最終的な最適フィッティングパラメータを決定し、メモリ14に格納するとともに、入出力手段15内のプリンタやCRTなどに表示する。

【0149】図32は、第3実施例の最適フィッティングパラメータ決定装置を実施する最適フィッティングパラメータ決定装置の機能的ブロック図を示す。フィッティングパラメータ最適化装置10は、図30と同様の適応度算出手段11、遺伝的操作処理手段12、評価手段13、メモリ14、入出力手段15を有するとともに、局所的探索手法処理手段18、パラメータフィッティング処理手段19を有する。これらの適応度算出手段11、遺伝的操作処理手段12、評価手段13、局所的探索手法処理手段18、パラメータフィッティング処理手段19は、各々独立したCPUで構成されてもよいし、ひとつのCPUを時分割で使うことにより構成してもよい。物理モデル計算装置16は図31と同様に図33に示すようにフィッティングパラメータ最適化装置10に含まれてもよい。

【0150】最適化処理においては、まず入出力手段15内のキーボードなどから、実験データを予測するため物理モデルが選定され、その情報が物理モデル計算装置

16に与えられる。また、遺伝的アルゴリズムにおける、集団の個体数、交叉確率、突然変異確率、局所的探索手法のステップ幅などの諸定数も入力手段15からフィッティングパラメータ最適化装置10に与えられ、メモリ14の所定領域に記憶される。その後、メモリ14の所定領域に格納されている所定のプログラムに従って、CPUが処理を開始する。

【0151】適応度算出手段11では、物理モデル計算装置16に、複数条件での実験データを与えたのち、局所的探索処理手段18に局所的最適化計算を開始させるための信号を送る。局所的探索処理手段18では、物理モデル計算装置16とデータのやりとりを繰り返し、局所的な最適化計算を行う。局所的探索処理手段18で局所的最適化計算が終了したのち、その計算結果データがメモリ14に格納される。局所的探索処理手段18では、実験条件の数だけ上記局所的最適化計算を行い、すべての計算結果がメモリ4を通して適応度算出手段11に渡される。

【0152】つぎに、適応度算出手段11では、パラメータフィッティング手段19になめらかな関数によるフィッティング計算を開始させるための信号を送る。パラメータフィッティング手段19では、メモリ4に格納された局所的最適化計算結果のフィッティングパラメータに対して、フィッティング関数を計算して求める。その計算結果データがメモリ14に格納され、適応度算出手段11に渡される。

【0153】適応度算出手段11では、そのフィッティングパラメータを、再度物理モデル計算装置16に送り、物理モデル計算装置16に計算を開始させる。物理モデル計算装置16の計算結果は、フィッティングパラメータ最適化装置10に渡され、メモリ14に格納される。そのデータを用いて、適応度算出手段11で適応度が最終的に計算されメモリ14に格納される。遺伝的操作処理手段12では、適応度算出手段11で定まった適応度を用いて、各種遺伝的操作を行い、その結果をメモリ14に格納する。評価手段13は、遺伝的アルゴリズムの終了条件を計算し、それが満たされた場合には、最終的な最適フィッティングパラメータを決定し、メモリ14に格納するとともに、入出力手段15内のプリンタやCRTなどに表示する。

【0154】更に、本発明は、前記説明した最適フィッティングパラメータ決定方法の図2、図3、図7、図10～図15、図22、図24および図25の処理手順をコンピュータに実施させる最適フィッティングパラメータ決定プログラムを提供する。本発明の最適フィッティングパラメータ決定プログラムは記録媒体又はインターネットにより、例えば図30～図33のような各手段を構成したコンピュータの入出力装置を介してインストールされ、単数又は複数のメモリに格納される。これによって、コンピュータは本発明の方法を実施する装置とな

る最適フィッティングパラメータ決定装置となる。

【0155】本発明は、いうまでもなく、複数のパラメータを含んだ物理モデルのすべてのパラメータ、またはパラメータの一部、あるいは複数モデルが統合されたモデルのパラメータ、何れにも適応可能であり、物理モデルの規模を問わず、それらの応用は本発明の範囲から除外されるものではない。

【0156】以上、図示例を参照して本発明を説明したが、この発明は上述の例に限定されるものでなく、特許請求の範囲の記載の範囲内で当業者が容易に改変し得る他の構成をも含むものである。

【0157】

【発明の効果】以上説明したように、本発明によれば、次のような効果を得ることができる。物理モデルのフィッティングパラメータを実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を用意して遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータを最適化することにより、染色体の情報を離散化する処理が不要となり、離散化の精度によって得られる解の精度及び計算時間が影響されるということがなくなる。

【0158】さらに、前記遺伝的アルゴリズムが、少なくとも二つの親個体を選択する選択処理工程と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成工程と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理工程とを、少なくとも備えることにより、局所的な最適解にとらわれることなく、極めて有効に探索を進めることができる。

【0159】前記遺伝的アルゴリズムの子個体生成工程における交叉処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のおのの実数ベクトル成分に基づいて設定されることにより、集団中の親同士の距離が離れている探索序盤では大域的に探索を行い、親同士の距離が近い探索終盤では局所的に探索を行うことができる。

【0160】前記遺伝的アルゴリズムの子個体生成工程における突然変異処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のうち少なくとも一つの親個体に近づくに連れて生起確率が高くなることにより、突然変異処理において、有効に局所的な探索を行うことができる。

【0161】前記遺伝的アルゴリズムの選択処理工程において、三つの親個体を選択し、前記生起確率分布は、前記選択された三つの親個体のうち二つの親個体の中点を中心とした正規分布であって、正規分布の標準偏差は、前記二つの親個体の実数ベクトルを結ぶ主軸方向の

成分が前記二つの親個体の距離に比例し、それ以外の軸の成分が選択された三つの親個体のうち残りの一つの親個体と主軸との距離に比例することにより、個体集団の分布を保ちつつ集団中の親同士との距離が離れている探索序盤では大域的に探索を行い、親同士との距離が近い探索終盤では局所的に探索を行うことができる。

【0162】前記遺伝的アルゴリズムの複数の個体の集団を格子点上に配置し、前記選択処理工程において、各個体と近傍の所定数の個体との間で地域的な小集団を形成し、地域的な小集団の中から少なくとも二つの親個体を選択することにより、集団全体が一つの遺伝子型に急速に統一されるという初期収束をなくすることができる。

【0163】前記遺伝的アルゴリズムの置換処理工程において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、1種類の評価基準がより優れている個体を次世代集団の個体とすることにより、複数の評価基準を1種類の評価基準に縮約することで計算時間を短縮できる。

【0164】前記遺伝的アルゴリズムの置換処理工程において、選択された親個体と前記複数の子個体から、2種類以上の評価基準の優越関係に基づいて次世代集団の個体を決定することにより、各評価基準に適合する複数の最適解を基に総合的に判断した最適フィッティングパラメータを求めることができる。

【0165】前記遺伝的アルゴリズムを用いて最適化したフィッティングパラメータに対して、局所的探索手法による最適化を行うことにより、探索の終盤における探索速度の低下を防止して、フィッティングパラメータの精度をより向上することができる。

【0166】測定データの実験条件の組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、更に、実験条件間においてフィッティングパラメータがなめらかに変化するように総合的にフィッティングした物理モデルを求めることにより、実験を行っていない実験条件においても誤差なく物理現象を物理モデルでシミュレーションできる。

【図面の簡単な説明】

【図1】物理モデルによる測定データのフィッティングを説明するための説明図である。

【図2】本発明のフィッティングパラメータ最適化方法の処理手順の概略を示すフロー図である。

【図3】一般的な遺伝的アルゴリズムの手順の概略を示すフロー図である。

【図4】一般的な遺伝的アルゴリズムで用いる染色体を示す説明図である。

【図5】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで用いる染色体とそれにより最適化されたフィッティングパラメータを示す説明図である。

【図6】第1実施例の遺伝的アルゴリズムで用いる適応度を説明する図である。

【図7】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで行う交叉処理の手順を示すフロー図である。

【図8】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで行う交叉処理例を説明する図である。

【図9】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで行う突然変異処理の手順を示す説明図である。

【図10】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで行う置換処理の手順を示すフロー図である。

【図11】第1実施例の遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータ最適化を行う処理の手順を示すフロー図である。

【図12】第1実施例の変形例における地域的な小集団を例示的に説明する図である。

【図13】第1実施例の変形例における選択処理の手順を示すフロー図である。

【図14】第2実施例の遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータ最適化を行う処理の手順を示すフロー図である。

【図15】第2実施例の置換処理の手順を示すフロー図である。

【図16】第1実施例のフィッティングパラメータ最適化計算されたフィッティング曲線（実験条件1）を示す図である。

【図17】第1実施例のフィッティングパラメータ最適化計算されたフィッティング曲線（実験条件10）を示す図である。

【図18】実験条件毎に計算したフィッティングパラメータ R_p の変化を説明する図である。

【図19】実験条件毎に計算したフィッティングパラメータ σ_p の変化を説明する図である。

【図20】実験条件毎に計算したフィッティングパラメータ γ の変化を説明する図である。

【図21】実験条件毎に計算したフィッティングパラメータ β の変化を説明する図である。

【図22】第3実施例の遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータ最適化を行う処理の手順を示すフロー図である。

【図23】第3実施例における、染色体、遺伝子と実験条件、フィッティングパラメータとの対応を示す図である。

【図24】第3実施例のなめらかさ考慮した適応度計算の処理手順を示すフロー図である。

【図25】第3実施例のある実験条件における平均自乗誤差の計算の処理手順を示すフロー図である。

【図26】第3実施例によって計算されたフィッティングパラメータ R_p の変化を説明する図である。

【図27】第3実施例によって計算されたフィッティングパラメータ σ_p の変化を説明する図である。

【図28】第3実施例によって計算されたフィッティングパラメータ γ の変化を説明する図である。

【図29】第3実施例によって計算されたフィッティングパラメータ β の変化を説明する図である。

【図30】第1実施例、第2実施例の方法を実施するフィッティングパラメータ最適化装置の機能的ブロック図である。

【図31】第1実施例、第2実施例の方法を実施するフィッティングパラメータ最適化装置に物理モデル計算手順が含まれる場合の機能的ブロック図である。

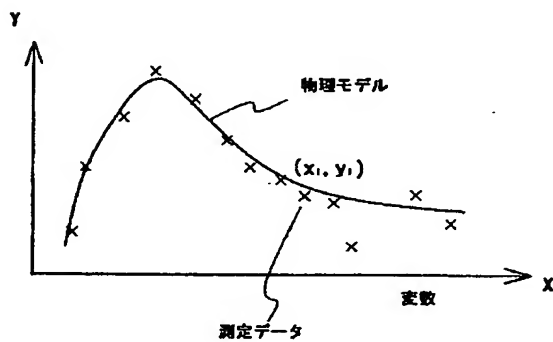
【図32】第3実施例の方法を実施するフィッティングパラメータ最適化装置の機能的ブロック図である。

【図33】第3実施例の方法を実施するフィッティングパラメータ最適化装置に物理モデル計算手順が含まれる場合の機能的ブロック図である。

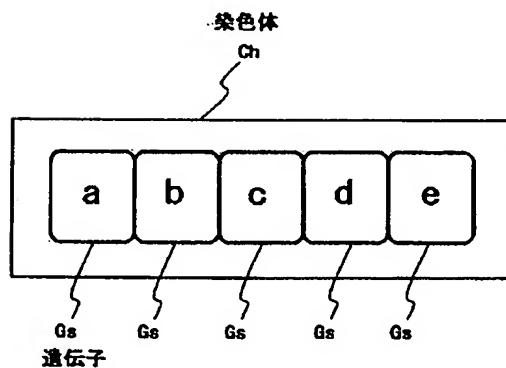
【符号の説明】

- 10 フィッティングパラメータ最適化装置
- 11 適応度算出手段
- 12 遺伝的操作処理手段
- 13 評価手段
- 14 メモリ
- 15 入出力手段
- 16 物理モデル計算装置
- 16M メモリ
- 17 物理モデル計算手段
- 18 局所的探索手法処理手段
- 19 パラメータフィッティング処理手段

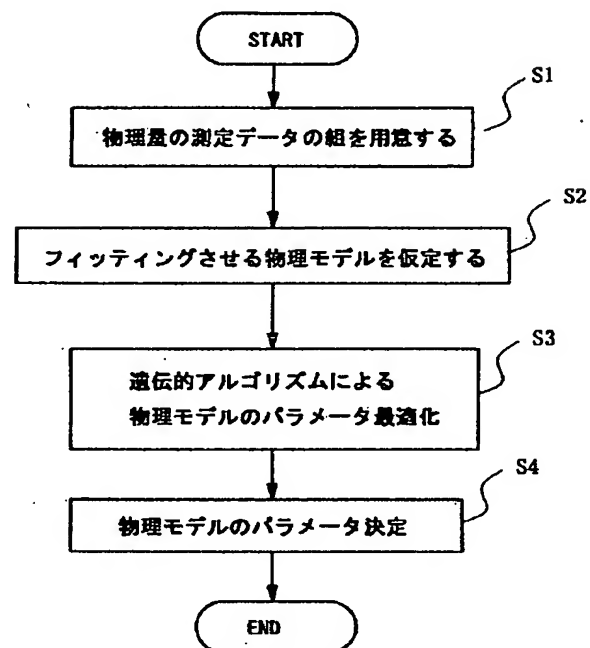
【図1】



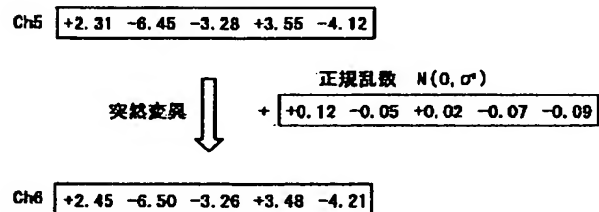
【図4】



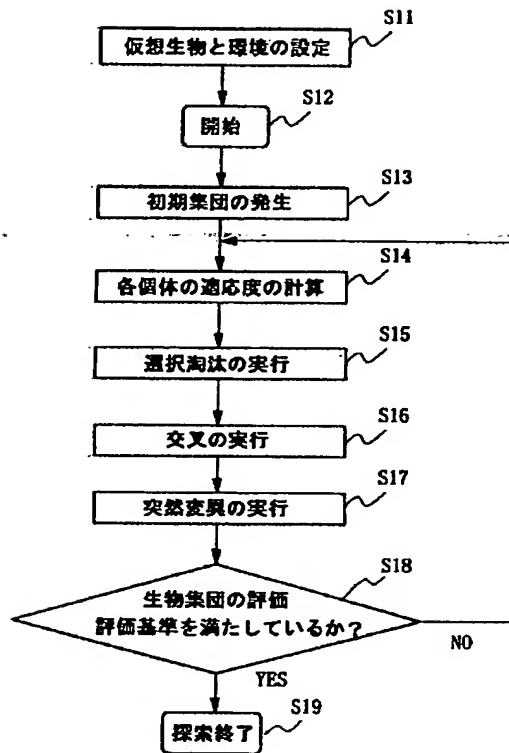
【図2】



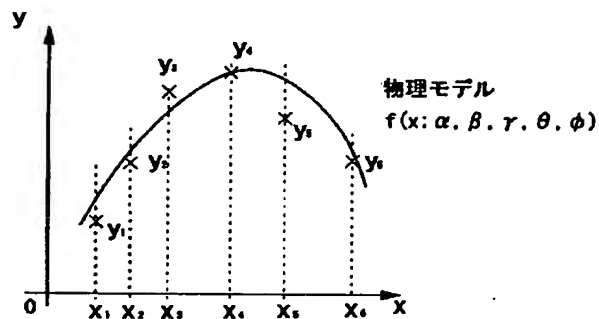
【図9】



【図3】



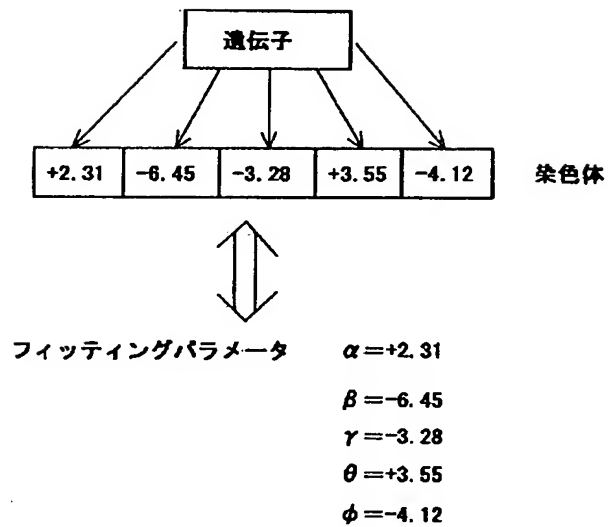
【図6】



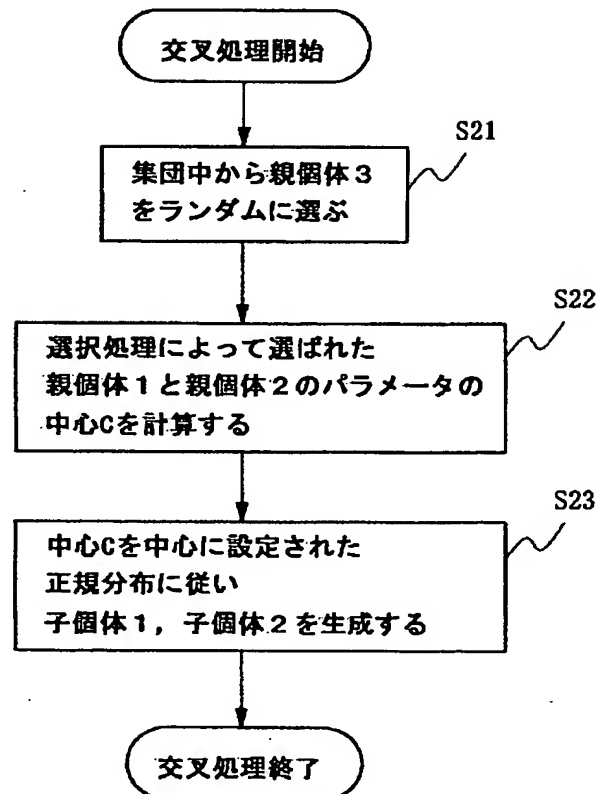
例1 適応度 = $\frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 (y_i - f(x_i))^2$

例2 適応度 = $\text{Max} |y_i - f(x_i)|$

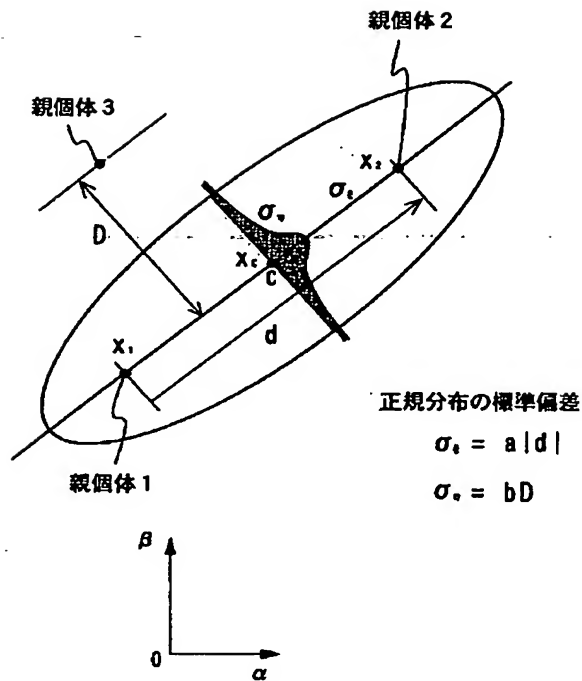
【図5】



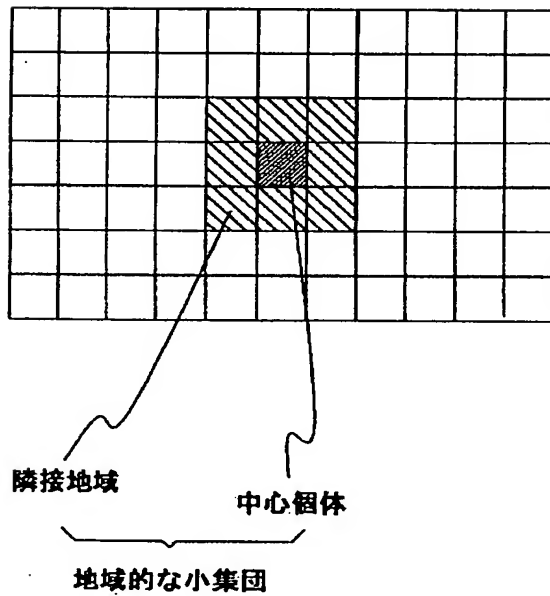
【図7】



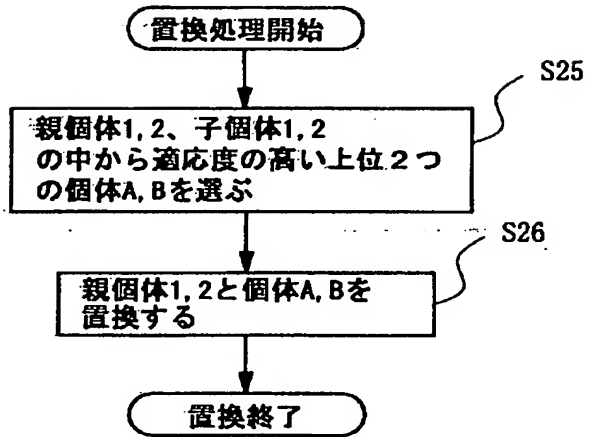
【図8】



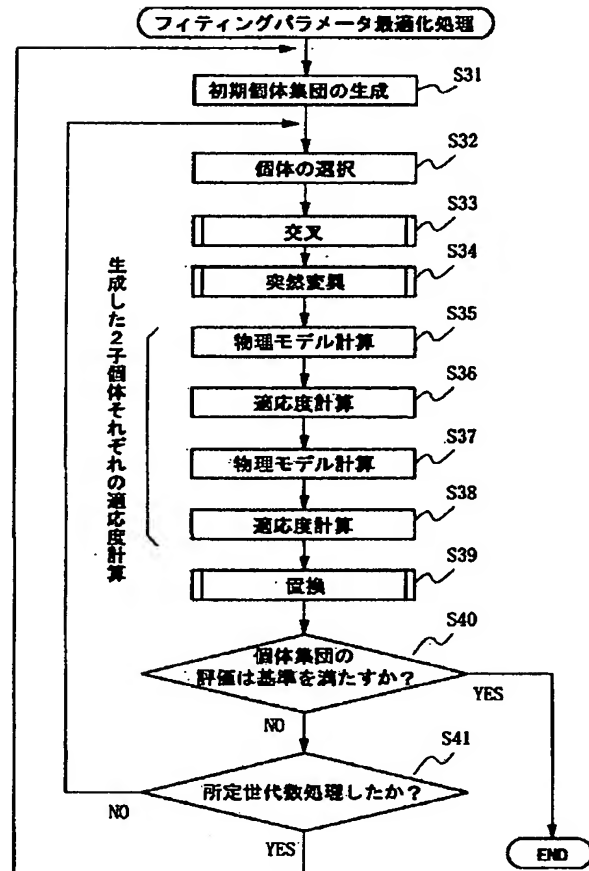
【図12】



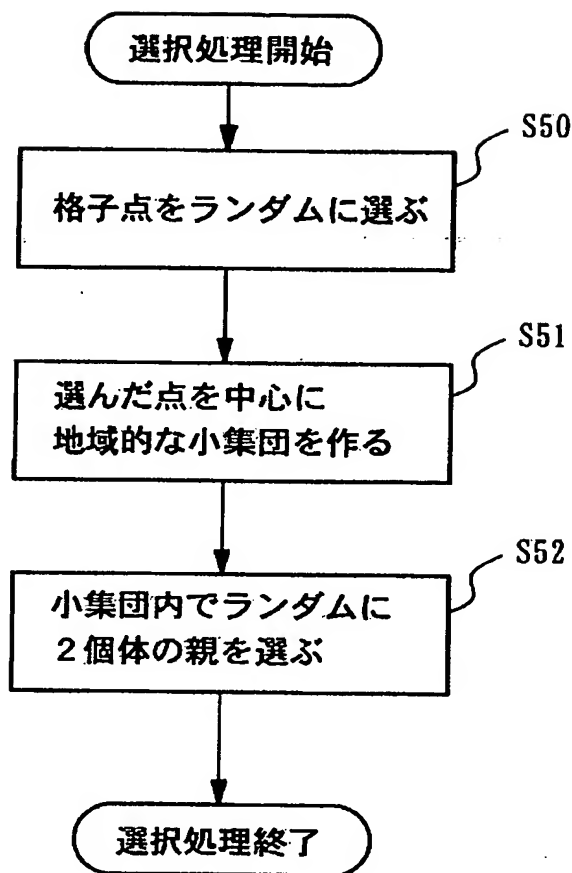
【図10】



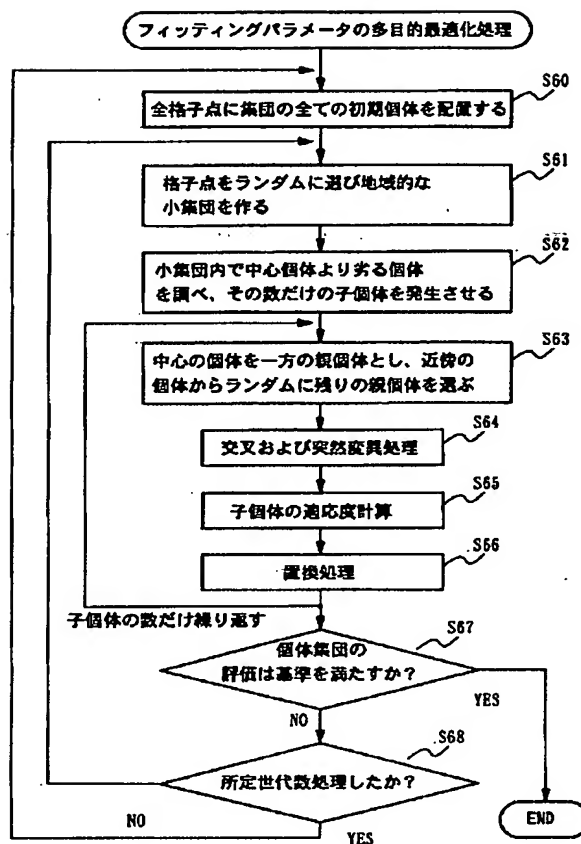
【図11】



【図13】

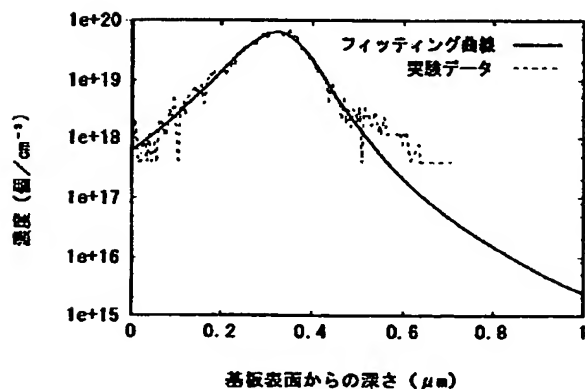


【図14】



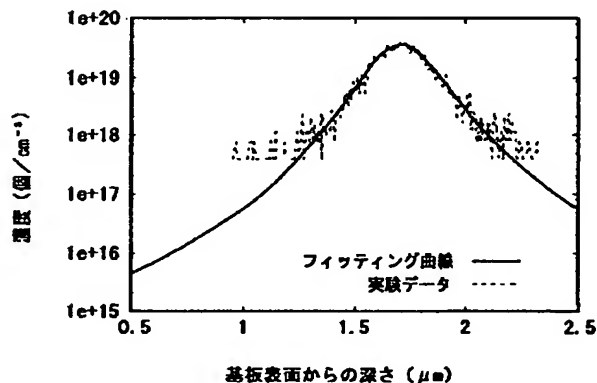
【図16】

Pearson分布型物理モデルでのフィッティング結果
(単結晶 Si 基板への100keV加速 B^+ 注入)

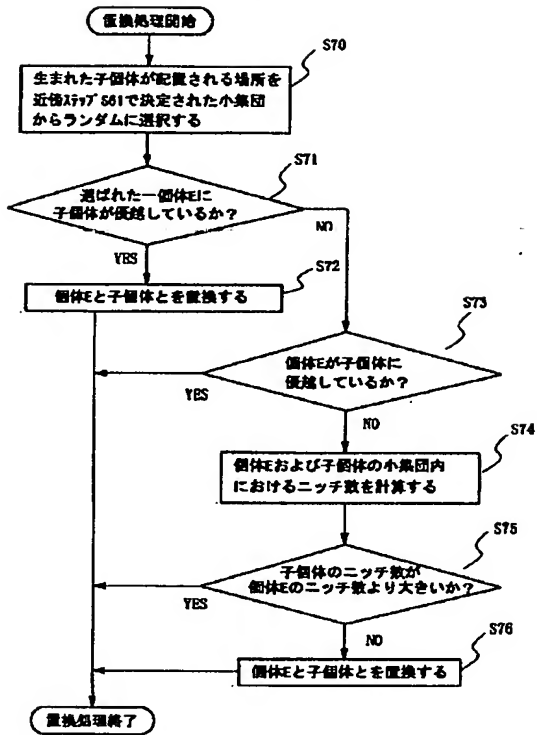


【図17】

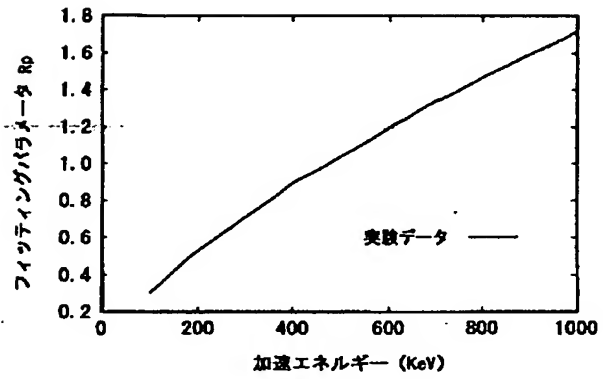
Pearson分布型物理モデルでのフィッティング結果
(単結晶 Si 基板への1000keV加速 B^+ 注入)



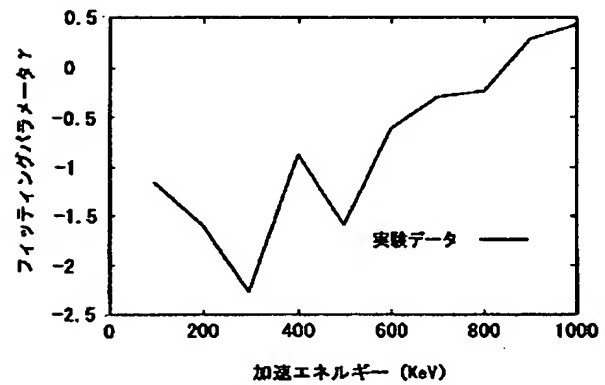
【図15】



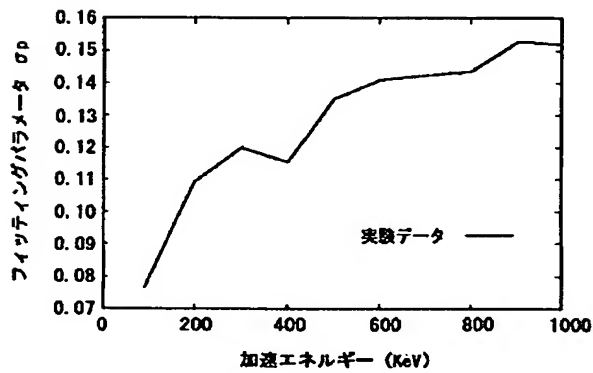
【図18】

加速エネルギーとフィッティングパラメータ R_p との関係

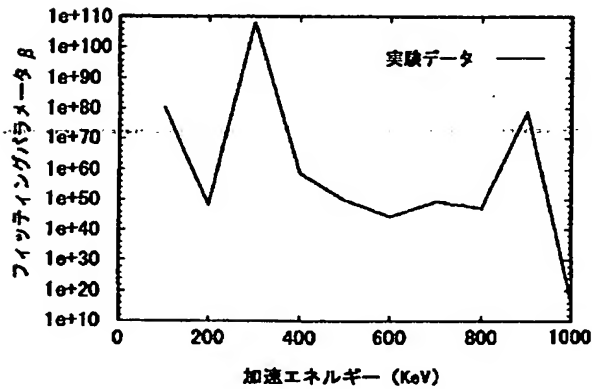
【図20】

加速エネルギーとフィッティングパラメータ γ との関係

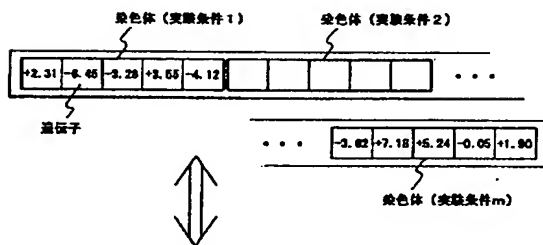
【図19】

加速エネルギーとフィッティングパラメータ σ_p との関係

【図21】

加速エネルギーとフィッティングパラメータ β との関係

【図23】



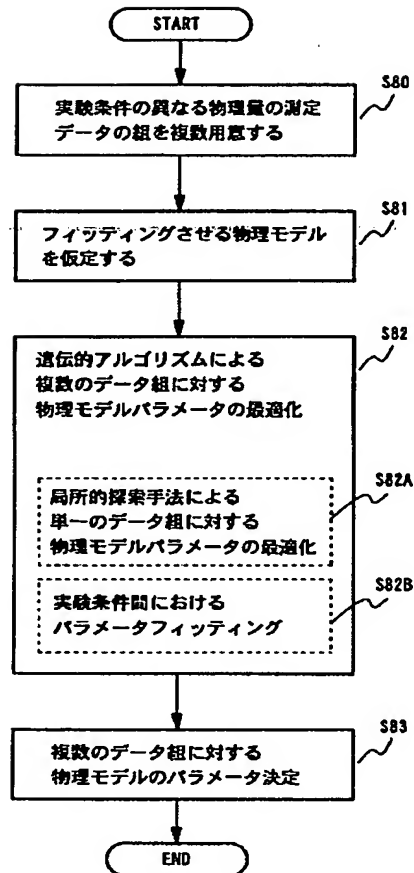
実験条件1での
フィッティングパラメータ

$\alpha_1 = +2.31$
 $\beta_1 = -6.45$
 $\gamma_1 = -3.28$
 $\theta_1 = +3.55$
 $\phi_1 = -4.12$

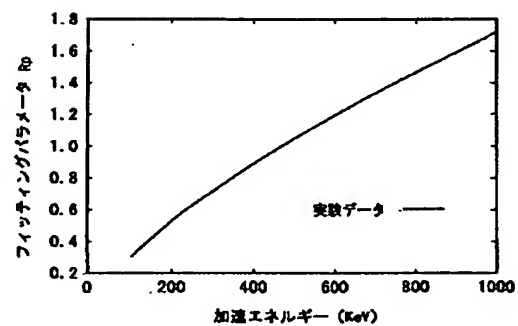
実験条件mでの
フィッティングパラメータ

$\alpha_m = -3.62$
 $\beta_m = +7.18$
 $\gamma_m = +5.24$
 $\theta_m = -0.05$
 $\phi_m = +1.90$

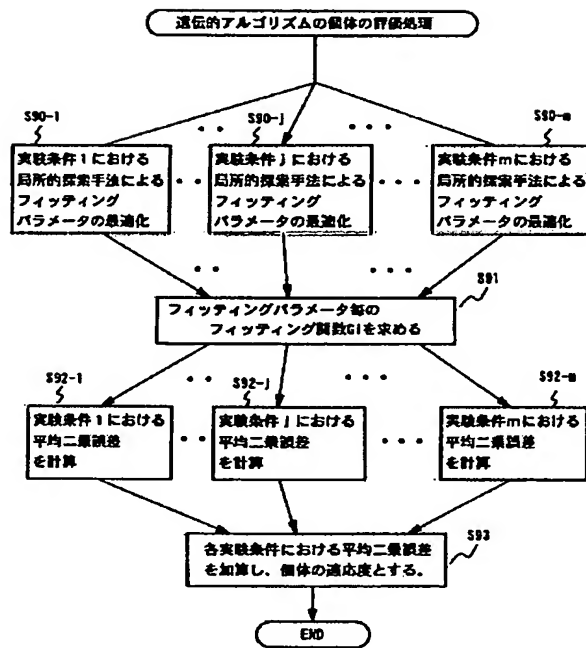
【図22】



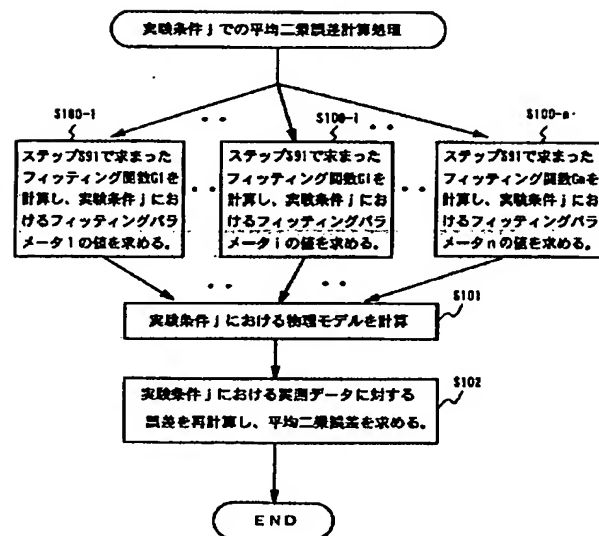
【図26】

加速エネルギーとフィッティングパラメータ R_0 との関係

【図24】



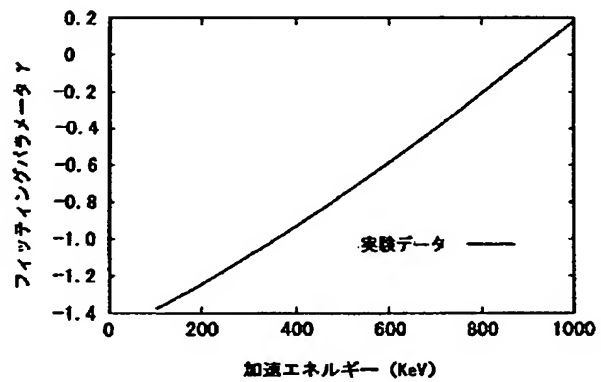
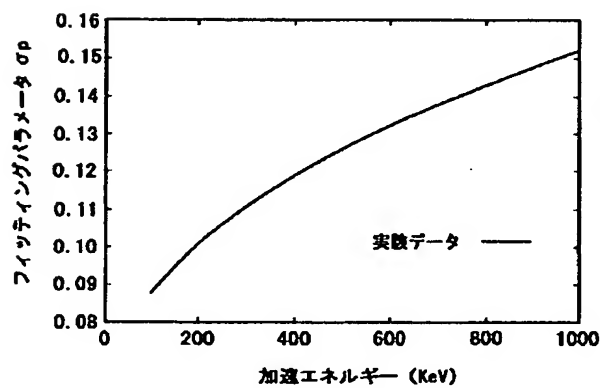
【図25】



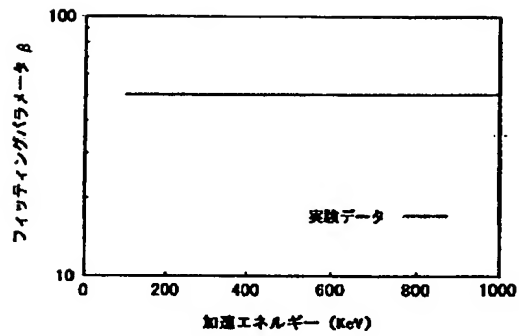
【図28】

加速エネルギーとフィッティングパラメータ γ との関係

【図27】

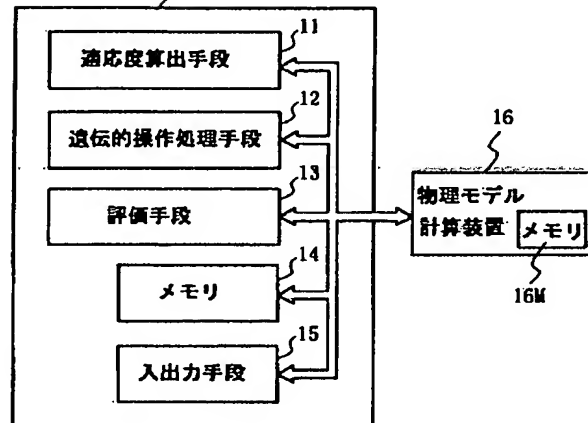
加速エネルギーとフィッティングパラメータ σp との関係

【図29】

加速エネルギーとフィッティングパラメータ β との関係

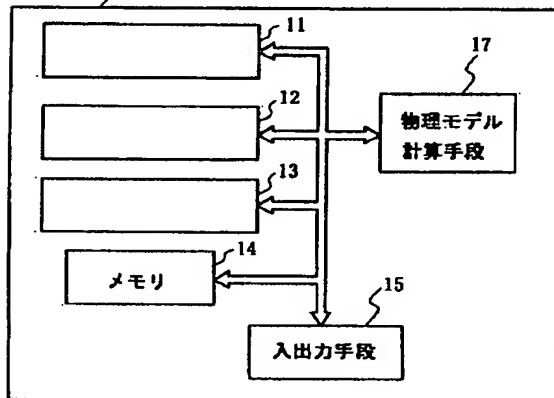
【図30】

10 フィッティングパラメータ最適化装置



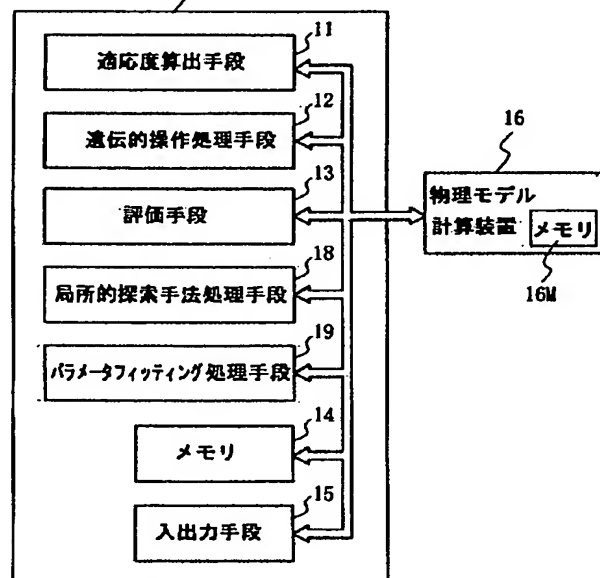
【図31】

10 フィッティングパラメータ最適化装置



【図32】

10 フィッティングパラメータ最適化装置



前記適応度算出手段は前記パラメータフィッティング処理手段によって求めたフィッティングパラメータに基づいて適応度を算出し、

前記遺伝的操作処理手段は、

少なくとも二つの親個体を選択する選択処理部と、

前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成部と、

前記選択された親個体と前記複数の子個体から、次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理部とを少なくとも備え、

次世代個体集団が評価基準を満たしたときの個体集団の中の高い適応度をもつ個体により、前記物理モデルの最適なフィッティングパラメータとすることを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項5】 前記最適化手段は、局所的探索手法により最適化を行うことを特徴とする請求項4記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項6】 前記局所的探索手法は、準ニュートン法であることを特徴とする請求項5記載の最適フィッティングパラメータ決定装置。

【請求項7】 複数のパラメータを有する物理モデルのパラメータを、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を、遺伝的アルゴリズムを用いて最適化することにより最適なフィッティングパラメータを得ることをコンピュータに実施させる最適フィッティングパラメータ決定プログラムであって、

最適化手法によって測定データの組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、実験条件間の変化がなめらかになるようにフィッティング関数で該フィッティングパラメータをフィッティングし、実験条件毎の物理モデルの最適なフィッティングパラメータを総合的に決定する処理をコンピュータに実施させることを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項8】 前記最適化手法は、局所的探索手法により行われることを特徴とする請求項7記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【請求項9】 前記局所的探索手法は、準ニュートン法により行われることを特徴とする請求項8記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、物理量の測定により取得された離散的なデータに対し、複数のパラメータを有する物理モデルをなるべく一致させ、その最適なフィッティングパラメータを決定する方法および装置、並びに最適フィッティングパラメータ決定プログラムに関

する。

【0002】

【従来の技術】物理現象を実験結果から解析し、その解析結果を用いてその物理現象を予測するということは、工学において頻繁に行われている。その場合、行われる手順としては、実験結果を説明する物理モデルを仮定し、その物理モデルのパラメータを実験結果(x_i, y_i)になるべく一致するようにフィッティング(fitting)させた物理モデルを決定する(図1参照)ことが行われている。一度、フィッティングパラメータを決定すれば、その物理モデルを用いて、実験を行わずにその物理現象を予測できる。

【0003】しかし、物理現象をなるべく高い精度で予測するためには、物理モデルのパラメータを精度良くフィッティングする必要がある。このために、従来は最小二乗法を用いたフィッティングが行われてきた。例えば、特開平7-73207号公報では、あらかじめ定めた原子間ポテンシャル関数のパラメータを、実験結果に一致するように最小二乗法で決定する方法が提案されている。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】ところが近年、より精度良く物理現象を予測することが求められており、仮定する物理モデルがより複雑化し高度化している。そのため、フィッティングすべきパラメータの数が増加し、従来の最小二乗法を用いたのでは、計算に時間がかかる場合が多い。

【0005】また複雑な物理モデルのパラメータをフィッティングする場合、計算の初期パラメータの設定が重要となる。この初期パラメータの設定が悪い場合、収束に長時間を要したり、場合によってはまったく異なった解を得てしまう。これは、パラメータ空間において、パラメータ値が反復計算の途中でローカルミニマムに陥ってしまうからである。その結果、最適な初期値を求めるために、結局試行錯誤によらなければならない、多大な手間や時間を要するという問題があった。

【0006】さらに、最小二乗法を用いる場合は、その評価基準として、実験データと物理モデルから計算される予測データとの誤差の二乗和を用いている。しかし、物理モデルのパラメータを精度良くフィッティングしようとした場合、その二乗和を評価するだけでは不十分で、誤差の絶対値の最大値なども評価する必要がある。しかしながら、従来の最小二乗法では、誤差の二乗和以外は扱うことができなかった。

【0007】一方、遺伝的アルゴリズムは、確率的探索手法の一つであり、(1)大域的な探索において有効に作用し、(2)評価関数以外には微分値等の派生的な情報が必要でなく、(3)しかも容易な実装性を持つ、アルゴリズムである。このアルゴリズムは、フィッティングパラメータの最適化に適用可能であり、上記の問題を

解決する可能性がある。しかし従来技術では、遺伝的アルゴリズム中で用いられる遺伝的操作が離散的なパラメータ値（2進数値）しか扱えないため、本来連続値である物理モデルのパラメータを離散化する必要があり、十分な精度を持つ解を実用的な時間で得ることが困難であった。

【0008】つまり、従来の離散的な遺伝的アルゴリズムでは、十分な精度の解を得ようとする場合、各パラメータの離散化の程度を細かくする必要があり、必然的に遺伝子情報が多くなるために、著しい計算時間の増加を招いてしまう。逆に、実用的な計算時間で解を得るために各パラメータを粗く離散化すれば、離散化の最小刻みの間に最適解が存在する場合、最適解に到達しない危険性があった。

【0009】さらに、従来の遺伝的アルゴリズムには、初期収束という問題があった。これは、探索の初期の段階で比較的精度が良い解が発見されてしまうと、その解に似た個体が集団中をほとんど占めてしまい、その後探索が進まなくなってしまう問題である。フィッティングパラメータ最適化の問題は、多数のローカルミニマムをもつ可能性があるため、この初期収束が頻繁に起こり十分な精度の解を得られないという問題があった。

【0010】この初期収束の問題を回避するために、従来技術では、一般に遺伝的アルゴリズムの集団の個体数を増やすことが行われてきたが、計算量が増加し、最適解への収束が遅くなるという問題を生じた。

【0011】そこで本発明は、このような従来の技術の有する未解決の課題に着目してなされたものであって、物理モデルのパラメータを効率的に精度良く最適にフィッティングすることを目的としている。

【0012】

【課題を解決するための手段】すなわち請求項1記載の発明は、複数のパラメータを有する物理モデルにおいて、物理量の測定により取得された離散的なデータ点に対する最適なフィッティングパラメータを決定するために、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として前記パラメータを実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を用意して遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータの最適化する最適フィッティングパラメータ決定方法であって、前記物理モデルは異なる実験条件毎に用意され、実験条件を段階的に変化させて測定データの組を複数用意し、最適化手法によって測定データの組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、該フィッティングパラメータは、実験条件間の変化がなめらかになるようにフィッティング関数でフィッティングされ、実験条件毎の物理モデルの最適なフィッティングパラメータを総合的に決定することを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定方法である。このような発明によれば、染色体の情報を離散化する処理が不要となり、離散化の精度によって得られ

る解の精度及び計算時間が影響されるということがなくなる。

【0013】請求項2記載の発明は、請求項1記載の最適化手法を局所的探索手法により行うことを特徴とする。請求項3記載の発明は、請求項2記載の局所的探索手法が準ニュートン法により行われることを特徴とする。

【0014】更に、請求項4の発明は、複数のパラメータを有する物理モデルの最適なフィッティングパラメータを決定する装置であって、物理量の測定により取得された離散的なデータ点に対し、測定データと物理モデルから計算した予測値に基づいて適応度を算出する適応度算出手段と、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として前記パラメータを実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団に対して遺伝的アルゴリズムの遺伝的操作を行う遺伝的操作処理手段と、次世代個体集団が評価基準を満たすか否かを判断する判断手段と、段階的に変化した実験条件毎に用意された複数の測定データの組に対し、最適化手法によって測定データの組毎に最適なフィッティングパラメータを求める最適化手段と、該フィッティングパラメータを実験条件間の変化がなめらかになるようにフィッティング関数でフィッティングするパラメータフィッティング処理手段とを具備し、前記適応度算出手段は前記パラメータフィッティング処理手段によって求めたフィッティングパラメータに基づいて適応度を算出し、前記遺伝的操作処理手段は、少なくとも二つの親個体を選択する選択処理部と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成部と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理部とを少なくとも備え、次世代個体集団が評価基準を満たしたときの個体集団の中の高い適応度をもつ個体により、前記物理モデルの最適なフィッティングパラメータとすることを特徴とする。

【0015】請求項5記載の発明は、請求項4記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、前記最適化手段が局所的探索手法により最適化を行うものであることを特徴とする。請求項6記載の発明は、請求項5記載の最適フィッティングパラメータ決定装置において、局所探索手法が準ニュートン法であることを特徴とする。

【0016】複数のパラメータを有する物理モデルのパラメータを、遺伝的アルゴリズムの染色体情報として実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を、遺伝的アルゴリズムを用いて最適化することにより最適なフィッティングパラメータを得ることをコンピュータに実施させる最適フィッティングパラメータ決定プログラムであって、最適化手法によって測定デー

タの組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、実験条件間の変化がなめらかになるようにフィッティング関数で該フィッティングパラメータをフィッティングし、実験条件毎の物理モデルの最適なフィッティングパラメータを総合的に決定する処理をコンピュータに実施させることを特徴とする最適フィッティングパラメータ決定プログラム。

【0017】請求項記載8の発明は、請求項8記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、最適化手法が、局所的探索手法であることを特徴とする。請求項9記載の発明は、請求項7記載の最適フィッティングパラメータ決定プログラムにおいて、局所探索手法が準ニュートン法であることを特徴とする。

【0018】

【発明の実施の形態】以下に、本発明の実施の形態を実施例によって、添付図面を参照して説明する。図2は、本発明の第1実施例による、物理モデルの最適フィッティングパラメータを決定する方法のフロー図を示す。図2において、まずステップS1で、物理量の離散的な測定データの組を用意する。次のステップS2で、その測定データにフィッティングさせる物理モデルを仮定し、次のステップS3で、遺伝的アルゴリズムによってステップS2で仮定した物理モデルのパラメータを実験結果データにフィットするように最適化し、最後にステップS4で最終的な物理モデルのパラメータを決定する。

【0019】遺伝的アルゴリズムの参考文献としては、例えば、出版社ADDISON-WESLEY PUBLISHING COMPANY, INC. が1989年に出版した、David E. Goldberg著の「Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning」がある。

【0020】一般的な遺伝的アルゴリズムでは、まず遺伝子を持つ仮想的な生物の集団を設定し、あらかじめ定めた環境に適応している個体が、その適応度の高さに応じて生存し、子孫を残す確率が増えるようにする。そして、遺伝的操作と呼ばれる手順で親の遺伝子を子に継承させる。このような世代交代を実行し、遺伝子および生物集団を進化させることにより、高い適応度を持つ個体が生物集団の大勢を占めるようになる。そしてその際の遺伝的操作としては、実際の生物の生殖においても生じる、遺伝子の交叉、および突然変異等が用いられる。

【0021】図3は、遺伝的アルゴリズムの概略手順を説明するフロー図を示す。この手順では、初めのステップS11で、個体の染色体構造を決定する。すなわち、世代交代の際に親の個体から子孫の個体に、どのような内容のデータをどのような形式で伝えるかを定める。図4に染色体構造を例示する。ここでは、対象とする最適化問題の変数ベクトル x を、 n 個の記号 A_i ($i=1, 2, \dots, n$)の列で表わすことにし、これを n 個の遺伝

子からなる染色体とみなす。図4中、 Ch は染色体、 G_s は遺伝子を表し、遺伝子 G_s の個数 n は5である。遺伝子の値 A_i としては、一般的に0および1の2値を用いる。図4の例では、 $a \sim e$ のアルファベットが遺伝子である。このようにして記号化された遺伝子の集合が個体の染色体である。

【0022】図3のステップS11では、次に各個体が環境にどの程度適応しているかを表わす適応度の計算方法をメモリから選択し、決定する。その際、対象とする最適化問題の評価関数の値がより高い変数あるいはより低い変数ほど、それに対応する個体の適応度が高くなるように設計する。またその後に行う世代交代では、適応度の高い個体ほど、生き残る確率あるいは子孫を作る確率が他の適応度の低い個体よりも高くなるようにする。逆に、適応度の低い個体は、環境にうまく適応していない個体とみなして、消滅させる。これは、進化論における自然淘汰の原理を反映したものである。すなわち適応度は、生存の可能性という面から見て各個体がどの程度優れているかを表わす尺度となる。

【0023】遺伝的アルゴリズムでは、探索開始時においては、対象とする問題は一般に全くのブラックボックスであり、どのような個体が望ましいかはまったく不明である。このため通常、初期の生物集団は乱数を用いてランダムに個体を発生させている。従ってここにおける手順でも、ステップS12で処理を開始した後のステップS13では、初期の生物集団は乱数を用いてランダムに発生させる。なお、探索空間に対して何らかの予備知識がある場合は、評価値が高いと思われる部分を中心に生物集団を発生させるなどの処理を行うこともあ

る。ここで、発生させる個体の総数を、集団の個体数という。

【0024】次にステップS14で、生物集団中の各個体の適応度を、先にステップS11で決めた計算方法により計算する。各個体について適応度が求まったら、次にステップS15で、次世代の個体の基となる個体を集団から選択淘汰する。しかしながら選択淘汰を行うだけでは、現時点で最も高い適応度を持つ個体が生物集団中に占める割合が高くなるだけで、新しい探索点が生じないことになる。このため、次に述べる交叉と突然変異と呼ばれる操作を行う。

【0025】即ち、次のステップS16の処理では、選択淘汰によって生成された次世代の個体の中から、所定の発生頻度で二つの個体のペアをランダムに選択し、染色体を組み変えて子染色体を作る(交叉処理)。ここで、交叉が発生する確率を、交叉率と呼ぶ。交叉によって生成された子孫の個体は、親にあたる個体のそれぞれから形質を継承した個体である。この交叉処理によって、個体の染色体の多様性が高まり進化が生じる。

【0026】交叉処理後は、次のステップS17で、個体の遺伝子を一定の確率で変化させる(突然変異処

理)。ここで、突然変異が発生する確率を突然変異率と呼ぶ。遺伝子の内容が低い確率で書き換えられるという現象は、実際の生物の遺伝子においても見られる現象である。ただし、突然変異率を大きくしすぎると、交叉処理による親の形質遺伝の特徴が失われ、探索空間をランダムに探索することと同様になるので注意を要する。

【0027】以上の処理によって次世代の集団が決定され、次に、ステップS18で、生成された次世代の生物集団が探索を終了するための評価基準を満たしているか否かを調べる。この評価基準は、問題に依存するが、代表的なものとして次のようなものがある。

- ・生物集団中の最大の適応度が、あるしきい値より大きくなった。
- ・生物集団全体の平均の適応度が、あるしきい値より大きくなった。
- ・生物集団の適応度の増加率が、あるしきい値以下の世代が一定の期間以上続いた。
- ・世代交代の回数が、予め定めた回数に到達した。

【0028】上述の如き終了条件の何れかが満たされた場合は、ステップS19へ進んで探索を終了し、その時点での生物集団中で最も適応度の高い個体を、求める最適化問題の解とする。終了条件が満たされない場合は、ステップS14の各個体の適応度の計算の処理に戻って探索を続ける。このような世代交代の繰り返しによって、集団の個体数を一定に保ちつつ、個体の適応度を高めることが出来る。以上が一般的な遺伝的アルゴリズムの概略である。

【0029】上で述べた遺伝的アルゴリズムの枠組みは、実際のプログラミングの詳細を規定しない緩やかなものとなっており、個々の問題に対する詳細なアルゴリズムを規定するものではない。このため、遺伝的アルゴリズムを本発明の最適フィッティングパラメータの決定に際して、以下の項目を最適フィッティングパラメータ決定用に実現する必要がある。

- (a) 染色体の表現方法
- (b) 個体の評価関数
- (c) 選択淘汰方法
- (d) 交叉方法
- (e) 突然変異方法
- (f) 探索終了条件

【0030】(a) 染色体の表現方法：本実施例では、遺伝的アルゴリズムの染色体表現として、物理モデルのパラメータを実数ベクトルとして直接用いることを特徴としており、これにより、染色体の情報を離散化する処理を不要とし、離散化の精度によって得られる解の精度および計算時間が影響されるという問題点を解決できる。

【0031】このことを図5の遺伝子個体例を参照して、以下説明する。遺伝的アルゴリズムの染色体構造は物理モデルのパラメータ値(α , β , γ , θ , φ) (パラメータ数 $n=5$)に一对一に対応させる。物理モデル

のパラメータ値が(+2.31, -6.45, -3.28, +3.55, -4.12)であったとき、遺伝的アルゴリズムの染色体は(+2.31, -6.45, -3.28, +3.55, -4.12)となる。図5の例では、パラメータの個数 n は5個であるが、この個数は仮定した物理モデルによって異なる。

【0032】(b) 個体の評価関数：遺伝的アルゴリズムの個体の評価関数、つまり適応度は、例えば、実験結果の離散的な測定データと、染色体に記述されたパラメータによって定まる物理モデルから計算した予測値との差の平均二乗値を使用する。また、適応度評価は上記の差の平均二乗値ではなく、差の絶対値の最大値を用いてもよい。図6の例は、変数を x とする物理モデル $y=f(x)$ とし、6組の実験データ(x_1, y_1)~(x_6, y_6)から5個のフィッティングパラメータ($\alpha, \beta, \gamma, \theta, \varphi$)を求める場合で、物理モデル環境に適した評価関数として図の例1, 例2の2関数を使用できる例を示している。

【0033】このように定めた評価関数は、多数の局所的な最適解(ローカルミニマム)を持つ可能性がある。そのため、一般的な探索手法である山登り法やシンプレックス法を用いたのでは、局所的な最適解に探索が捕われてしまい、その結果、精度の良いフィッティングパラメータを得ることができない。しかし、遺伝的アルゴリズムは、確率的な探索手法であり、かつ、複数の探索点を用いる並列探索手法であることから、局所的な最適解に捕われにくい特徴があり、本実施例の評価関数を使用することにより極めて有効に探索を進めることができる。

【0034】(d) 交叉方法：交叉は、従来の離散的な2進数値を扱う遺伝的アルゴリズムでは、染色体の遺伝子を部分的に入れ替える操作が行われている。しかしながら、2進数表現により定義される遺伝子型の空間は、実数値に変換後における実際のフィッティングパラメータの空間とは、位相構造が大きく異なる。たとえば、2進数上である1ビットが反転しても、変換後のパラメータは、反転したビットの位置によってその影響が異なる。最上位ビットが反転した場合、そのパラメータ値を大きく変化するが、最下位ビットが反転した場合は、パラメータ値はほとんど変化しない。

【0035】そのため、従来の遺伝子を部分的に入れ替える交叉方法では、パラメータ空間の連続性が考慮されていないために、親個体の獲得した形質が子個体に適切に継承されない。そのために、無駄な探索を繰り返したり、十分な探索が行われないなどの問題が生じ、効率良く最適化が行われない。そこで本発明では、フィッティングパラメータの連続性を考慮した、新しい交叉方法を考案した。

【0036】図7は本発明に使用する交叉処理の1例の概略フロー図を示す。まず、ステップS21において、個体集団から親個体3をランダムに選ぶ。つぎに、ステ

ップS22において、図3のステップS15の選択によって選ばれた親個体1、親個体2のパラメータ空間での中点Cを計算する。そして、ステップS23において、その中点Cの周辺に設定された連続的な所定の生起分布、例えば正規分布確率に従って二つの子個体を生成する。具体的には、次の式(1)に従って子個体が発生す

$$X_k = X_c + \xi d + \sum_{i=1}^{n-1} \eta_i e_i D \dots \dots \dots (1)$$

ここで、

$$X_c = \frac{1}{2} (X_1 + X_2)$$

$$d = X_2 - X_1$$

【0038】ここで、nはパラメータの個数(パラメータ空間の次元数)、 x_k は生成された子個体kのパラメータ空間での座標、 x_c は中点Cの座標、dは親個体1、親個体2を結ぶ直線(主軸と呼ぶ)のベクトル、Dは、主軸と親個体3の距離である。 e_i は、主軸に直交する部分空間(n-1次元)を張る正規直交基底ベクトルである。 ξ は、正規分布 $N(0, \sigma_\xi^2)$ に従う乱数、 η_i は、正規分布 $N(0, \sigma_{\eta_i}^2)$ に従う独立なn-1個の乱数である。親個体3をランダムに2回選んで、式(1)の子個体生成を2回繰り返せば、親個体1、2から子個体 x_{k1} 、 x_{k2} が生成できる。

【0039】図8は、フィッティングパラメータが α 、 β 2個(2次元パラメータ空間)の場合における正規分布確率の標準偏差の求め方を示す。正規分布の標準偏差の主軸方向成分 σ_ξ は、両親の距離|d|に比例($\sigma_\xi = a|d|$)し、それに直交する軸成分 σ_{η_i} は主軸と親個体3の距離Dに比例($\sigma_{\eta_i} = bD$)するように設定される。

【0040】このような交叉方法(子個体生成方法)を用いることにより、フィッティングパラメータの連続性を陽に扱うことができる。陽に扱えるとは、パラメータ空間で近傍にある個体が、遺伝子空間でも近傍にあることを意味する。もしも遺伝子表現を従来手法の2進数表現を用いた場合、パラメータ空間で近傍にある個体が、遺伝子空間で必ずしも近傍にあるとは限らず、探索過程が初期、終盤いずれの場合も大域的な探索が行われてしまう。しかし、上記手法によれば集団中の親同士の距離が離れている探索序盤では大域的に探索を行い、親同士の距離が近い探索終盤では局所的に探索を行うことができる。

【0041】(e) 突然変異方法：突然変異は、従来の離散的な2進数値を扱う遺伝的アルゴリズムでは、染色体の遺伝子の一部を反転させる操作が行われている。しかし、この操作もフィッティングパラメータの連続性を考

る。連続的な生起分布としては、コーシー分布など他の微分可能な生起分布を用いてもよい。

【0037】

【数1】

慮していないために、探索のいずれの過程においても大域的な探索と局所的な探索の両方を担当していた。そこで本実施例では、突然変異は、子個体の染色体の各遺伝子に正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従って発生させた正規乱数を加算する操作とした。これにより、突然変異は局所的な探索のみを担当することとなり、探索終盤で有効に探索を行うことができる。

【0042】図9の染色体例で本実施例の突然変異法を説明すると、染色体Ch5が、

(+2.31 -6.45 -3.28 +3.55 -4.12)

であるとき、各遺伝子について正規分布に従い独立に発生させた乱数が、

(+0.12 -0.05 +0.02 -0.07 -0.09)

であるとき、これを染色体Ch5に加算して染色体Ch6

(+2.45 -6.50 -3.26 +3.48 -4.21)

に変更する。正規分布の標準偏差をあまり大きくすると探索がランダムサーチと同じになるので、予備実験により適切な値を決定する。なお、加算する乱数として、正規分布以外のコーシー分布などの他の分布を用いてもよい。

【0043】(c) 選択淘汰方法：遺伝的アルゴリズムの選択淘汰は、集団から次世代に残す個体を選択する処理である。本発明では、図10の処理フローに示すように、例えば集団からランダムに二つの親個体1、2を選び、これに対して交叉、突然変異を適用し子個体1、2を生成し、親個体1、親個体2、子個体1、子個体2の4個体の内、適応度の値が高い上位二つの個体A、Bを選択し(ステップS25)、集団内の親個体1、2を選択された個体A、Bに置換する(ステップS26)。この置換処理は、一般的な遺伝的アルゴリズムのように集団全部の個体を一斉に変化させない点が大きな特徴である。これにより、少ない集団の個体数で探索を行うことが可能になる。

【0044】(f) 探索終了条件：個体の適応度が所定の条件を満たしたときに探索は終了する。ここでは、例えば、集団中の最大の適応度が予め定めたとしきい値を越えた場合とすればよい。

【0045】以上のように、染色体の表現方法、個体の適応度、交叉方法、突然変異方法、選択淘汰方法、探索終了条件を決め、遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータ最適化を行う第1実施例の処理を図11のフロー図により説明する。

【0046】まず、ステップS31で遺伝的アルゴリズムの初期集団として、一様乱数を用いて個体を複数作成する。これにより、初期集団の各染色体における各遺伝子の値は上限値と下限値のあいだのランダムな実数値をとることができる。但し、フィッティングパラメータの最適値の傾向について何らかの予備知識が存在する場合には、より適応度が高いと思われる個体を初期集団として作成するようにする。そして、初期集団それぞれの個体について適応度を計算し、選択、交叉、突然変異、置換を行って順次探索を行う。

【0047】ついで、ステップS32の個体の選択処理では、集団からランダムに二つの親個体1、2を選び、これらに対して以下の遺伝的操作を行う。

【0048】ステップS33の交叉処理では、図7に示したように、選択によって選ばれた親個体1、2およびランダムに選んだ親個体3から、子個体1、2を生成する。なお、この交叉処理を確率（交叉確率） P_c で発生させる。

【0049】ステップS33の交叉に引き続いて実行するステップS34の突然変異は、子個体1、2の染色体の遺伝子にガウス分布 $N(0, \sigma^2)$ に従って発生させた正規乱数を加算する処理を行って、染色体を変更する。なお、この突然変異処理が発生する確率を P_m とし、突然変異確率と呼ぶ。

【0050】そしてステップS34での突然変異処理が終了した後、得られた子個体1、2の染色体の値（フィッティングパラメータ値）で、実際に物理モデルを計算し、子個体1、2の適応度を計算する（ステップS35～S38）。こうして子個体1、2の適応度が算出されると、次に、ステップS39において、図10に示した処理手順に従って個体の置換処理が行われる。すなわち、親個体1、2と子個体1、2の4個体のうち、適応度が高い上位二つの個体A、Bが選ばれ、ついで、集団内の親個体1、2と個体A、Bを置換する。

【0051】上記の選択、交叉、突然変異、評価、置換の操作を繰り返し、ステップS40の判断で探索終了条件が満たされたときに、最適化処理は終了し、その時点での個体集団中で最も適応度の高い個体を遺伝的アルゴリズムで得られたフィッティングパラメータとする。なお、終了条件が満たされない場合は、ステップS32に戻って探索を続ける。

【0052】更に、一定回数繰り返しても探索終了条件を満たす染色体（フィッティングパラメータ値）が得られない場合には、ステップS41で現在の集団は初期収束をおこしていると判断され、再度初期集団の生成処理を行う。当然ながら、集団全部をつくり直さず、そのうちの50%の個体をランダムに新規に生成して入れ替えるようにしてもよく、また、やり直しをせずに、実験結果が物理モデルで説明できる範囲に収まっていないという警告を出して停止するようにしてもよい。

【0053】なお、遺伝的アルゴリズムは探索の終盤に、探索速度が落ちる場合がある。それは、大域的探索手法であるため、ある局所ピークに到達する速度では、最急降下法などの勾配を用いる局所的探索手法にはかなわないためである。よって、探索時間を更に短縮するために、遺伝的アルゴリズムによってパラメータを最適化した後に、図2のステップS3の処理に局所的探索方法を組み合わせてもよい（第1実施例の変形例）。局所的探索手法としては、例えば、公知の最急降下法、ニュートン法、準ニュートン法（quasi-Newton Method）などを用いればよい。

【0054】上述したように、本実施例のフィッティングパラメータ最適化方法では、物理モデルのパラメータを遺伝的アルゴリズムの染色体として直接表現し、遺伝的アルゴリズムに従ってフィッティング誤差を最小とするようにフィッティングパラメータを最適探索する。従って、人手による初期パラメータを選ぶための試行錯誤を必要とすることなく、さらには局所的なピークにとらわれることなく短い計算時間で効率的に物理モデルのフィッティングパラメータを最適に決定することができる。これにより、対象とする物理現象の予測精度を向上させることが可能となる。

【0055】なお、上述の第1実施例では、探索手法として遺伝的アルゴリズムを用いた。しかしながら、遺伝的アルゴリズムにおける適応度において、局所的な最適解の個数が少ない場合には、焼きなまし法とよばれるアルゴリズムを遺伝的アルゴリズムの代わりに用いることができる。また、局所的な最適解の個数が多い場合でも、遺伝的アルゴリズムと比較して最適化の結果得られる性能は低下するが高速に探索することができる。

【0056】焼きなまし法の詳細は、例えば、JOHN WILEY & SONSが1989年に出版した、E. Aarts and J. Korst 著の「Simulated Annealing and Boltzmann Machines」を参照されたい。焼きなまし法は、山登り法の一つであり、温度と呼ばれる制御パラメータによって、局所的な最適解に探索が捕らわれないような工夫を加えたものである。

【0057】次に、本実施例の別の変形例を図12、図13を参照して説明する。物理モデルのフィッティングパラメータ最適化問題は、多数のローカルミニマムをも

つ可能性があるので、初期収束が頻繁におこり十分な精度の解を得られない場合がある。そこで、集団内の遺伝子型の多様性をもつために、集団の中で遺伝的操作によって変化する個体の範囲（交叉において親が選ばれる範囲）を制限することを考案した。具体的には図11のステップS31において、集団の全ての個体を多次元の格子点上に配置し、各個体と近傍の一定数の個体との間で地域的な小集団を形成するようにする。なお、格子点の次元数と近傍の個体数はパラメータ数とは無関係に選ぶことができるが、数値実験の結果次元数が2または3、近傍の個体数は4ないし8が好適であった。図10は、2次元格子を示し、近傍の個体を8個体とした場合である。なお、n次元格子は、対称にするために端をトーラスをなすように互いに結合している。

【0058】遺伝的操作は、この地域的な小集団ごとに、局所的に行う。つまり、図11のステップS32において、図13に示すフロー図の選択処理を行う。まず、ステップS50において、全ての格子点から1点をランダムに選び、つぎにステップS51において、ステップS50で格子点を中心に、近傍の個体とともに地域的な小集団を形成する。そして、ステップS52において、小集団内でランダムに親個体1, 2を選択する。

【0059】以上のような処理によって、探索の途中で集団中のある個体の適応度が極端に高い場合でも、その個体が交叉において親に選ばれるケースが限定され、また交叉によってその個体に似た子個体が発生した場合であっても子個体が小集団内に配置されるために、その個体の影響は小集団の重なりを通して徐々にしか全体に波及しない。そのため、集団全体がひとつの遺伝子型に急速に統一されてしまう初期収束の問題が起これにくくなり、遺伝子型の多様性を保つことができる。

【0060】また、一つの個体に一つのプロセッサを割り当てることによって、フィッティングパラメータ最適化装置として、並列計算機を用いることができる。その場合、格子の次元数および近傍の個体数は、並列計算機のプロセッサのトポロジに応じて定められる。

【0061】本発明の応用例として、分子動力学法を利用した材料設計システムがある。分子動力学法は、物質を構成している各原子の運動を時時刻刻と古典的に解析する方法であり、このシミュレーションによって、材料の力学的性質や構造安定性、ある条件下における物質の動的挙動に関して分子・原子レベルから検討できる。分子動力学法を行うにあたって重要となるのは、物性に大きく影響する原子間ポテンシャルを事前に決めておかななくてはならないという点である。

【0062】つまり、原子間ポテンシャルを記述する近似的な関数形をあらかじめ仮定しておき、その関数に含まれるポテンシャルパラメータを適切な実験データとのフィッティングにより決定する。特に複雑な原子配置やアモルファス構造や安定構造から大きく歪んだ状態でのポテンシャル関数は、複雑になり、決定すべき未知のパラメータが増えるために、一般的な最小二乗法では収束しない場合が多い。そこで本発明の最適化方法を用いて、パラメータを最適化フィッティングすることにより、材料設計システムの精度と作業効率を高めることができる。たとえば、アモルファス構造をも再現する炭素原子のポテンシャル関数について本発明を適用する場合を考える。仮定する物理モデル関数は次の式(2)で表される。

【0063】

【数2】

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N f_c(r_{ij}) [a_{ij} f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \cdots \cdots (2)$$

ここで

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}), \quad f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij})$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{\pi (r_{ij} - R_{ij})}{(S_{ij} - R_{ij})} \right], & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0, & r_{ij} > S_{ij} \end{cases}$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \beta_i^{a_i} \zeta_{ij}^{a_i})^{-1/2n_i},$$

$$\zeta_{ij}^{a_i} = \sum_{k(\neq i, j)} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[\gamma^3 (r_{ij} - r_{ik})^3],$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + c_i^2/d_i^2 - c_i^2 / [d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2]$$

$$a_{ij} = (1 + \alpha_i^{a_i} \eta_{ij}^{a_i})^{-1/2n_i},$$

$$\eta_{ij} = \sum_{k(\neq i, j)} f_c(r_{ik}) \exp[\gamma^3 (r_{ij} - r_{ik})^3]$$

【0064】式(2)において、 r_{ij} は i j 結合の距離、 N が原子数、 f_R 、 a_{ij} 、 η_{ij} は反発力に関する変数、 f_A 、 b_{ij} 、 ζ_{ij} は引力に関する変数で、 b_{ij} は多体効果の影響が含まれている。また、 $f_c(r)$ は相互作用の打ち切り関数(カットオフ)、 θ_{ijk} は i j 結合と i k 結合の間の結合角であり、 R 、 S はカットオフに関するパラメータ、 A 、 B 、 λ 、 μ 、 γ 、 β 、 n 、 c 、 d 、 h 、 χ はその他のパラメータである。 χ は同種原子の場合1であり、ポテンシャル関数を簡単にするため $\alpha_i = 0$ 、 $\mu = \gamma$ としたので、未知のパラメータは9つとなる。これら未知パラメータをなるべく実験結果に一致するようにフィッティングし、いかに精度良くポテンシャル関数を設定するかが、材料設計システムでは重要になる。

【0065】実験データとしては、公知の物理実験方法を用いて、 r_{ij} 、 θ_{ijk} とポテンシャルの関係が複数組求まる。これら9つのパラメータを遺伝的アルゴリズムの染色体として表現し、実験データと予測結果の平均二乗誤差が最小となるように最適化する。その結果、

ダイヤモンド結晶やアモルファス構造に関して、従来手法に比較して精度よくポテンシャル関数を決定することができる。

【0066】次に、単結晶Si基板にB⁺を注入した場合のB⁺濃度分布(イオン注入分布、個/cm⁻³)の測定結果に対して本発明の第1の実施例における別の変形例の最適フィッティングパラメータ決定方法を使用して物理モデルのパラメータをフィッティング決定した実験結果を図16、図17について説明する。

【0067】B⁺濃度分布の実測データとして、ドーズ量(注入量)が 1×10^{15} (個/cm⁻²) (ここで、 1×10^{15} は 10^{+15} を表す。)のときに、加速エネルギーが100 keV~1 MeV区間における100 keV間隔の10組の濃度分布を得た。その実測データに対して、次の式(3)のPearson IV分布関数をフィッティングすべき物理モデルと仮定した。

【0068】

【数3】

$$\frac{df(s)}{ds} = \frac{(s-a)f(s)}{b_0 + b_1s + b_2s^2} \dots\dots (3)$$

$$\text{ここで } s = x - R_p$$

$$\begin{cases} a = -\gamma\sigma_p(\beta + 3)/A \\ b_0 = -\sigma^2(4\beta - 3\gamma^2)/A \\ b_1 = a \\ b_2 = -(2\beta - 3\gamma^2 - 6)/A \end{cases}$$

$$\text{ここで } A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$$

$$\ln\left[\frac{f(s)}{f_0}\right] = \frac{1}{2b_2} \ln(b_0 + b_1s + b_2s^2) - \frac{b_1/b_2 + 2b_1}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} \tan^{-1}\left(\frac{2b_2s + b_1}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}}\right)$$

【0069】実験例に対するフィッティング最適化計算では、フィッティングパラメータ R_p 、 σ_p 、 γ 、 β の値を順番に並べたものを遺伝的アルゴリズムの染色体とした（パラメータ数 $n=4$ ）。フィッティングパラメータの初期値は、 $R_p: 0.0 \sim 2.0$ 、 $\sigma_p: 0.0 \sim 0.25$ 、 $\gamma: -1.0 \sim 1.0$ 、 $\beta: 0.0 \sim 50.0$ の範囲に設定した。遺伝的アルゴリズムの評価関数は、実測データ値とフィッティングしたPearson IV分布関数値との平均二乗誤差を用いた。なお、誤差を計算する際には、濃度値の代わりに濃度値の常用対数値を用いた。また、分布の中心値から $\pm 20\%$ の範囲では、誤差に10倍の重み付けをして評価した。制約条件は、Pearson IV分布が成立するために式(3)中の $b_1^2 - 4b_0b_2 < 0$ 、 $b_2 < 0$ とし、もしこの条件を満たさない場合には、評価関数値を ∞ とした。

【0070】遺伝的アルゴリズムの個体集団における格子の次元数は2、近傍の個体は8個体とし、集団の個体数は25（ 5×5 ）とした。評価関数を2500回評価した時点（探索終了条件）で探索を打ち切り、最終世代において得られた最優秀個体に対して、準ニュートン法を用いた最適化を行い、最終的な解とした。

【0071】図16、図17は、上記実験におけるフィッティング最適化計算の実験結果を示す。図中、横軸は基板表面からの深さ（ μm ）、縦軸は濃度（常用対数目盛、単位は個/ cm^{-3} ）、破線は濃度の実測データを

表す。実線は本実施例における変形例の最適化計算によって求められた物理モデルのフィッティング曲線を示す。図16は、実験条件がB+の加速エネルギーが100keVの場合、図17は実験条件が加速エネルギー1MeVの場合である。図16、図17より、物理モデルのフィッティング曲線は実験データに対してなめらかにフィッティングされていることが分かり、本発明による最適フィッティング決定方法の有効性が確認できた。

【0072】次に本発明の第2実施例について説明する。フィッティングの評価基準として、一般には実験データと物理モデルから計算される予測データとの誤差の平均二乗和を用いる。しかし、例えば一点において極端な誤差を有していても、誤差の平均二乗和評価では誤差が小さくなって評価される場合、精度良くフィッティングしようとするには、その平均二乗和だけで評価するのでは不十分で、誤差の絶対値の最大値などでも評価する必要がある。

【0073】これらの複数の評価基準を同時に最適化しようとする場合、従来の遺伝的アルゴリズムでは、複数の評価基準の重みつき和をとって一つの目的関数にして、その目的関数を適応度として最適化している。その結果得られる解は、重み係数に大きく依存することになる。しかし、予め設定した重み係数が妥当であったかどうかは、複数の評価基準おのおのの重み係数を変更しながら様々な最適解を得て初めて確認できるものである。

したがって、満足できるフィッティングパラメータを得るために試行錯誤を繰り返す必要がある。

【0074】そこでこの問題を解決するために、複数の評価基準を重み付けすることなく、それぞれの評価基準に適合する解（パレート最適解）を遺伝的アルゴリズムを用いて直接的に求める手法を発明した。本発明の第2実施例の処理を図14のフロー図により説明する。

【0075】図14は、フィッティングパラメータの多目的最適化処理、即ち複数の評価基準を使用して最適化処理を行う処理フローを示している。ステップS60、ステップS61ないしS63の処理工程において、図11の処理フローのステップS31、ステップS32とそれぞれ相違している。まず、ステップS60において遺伝的アルゴリズムの初期個体を乱数を利用して生成し、図12に示すようにすべての格子点に配置する。次にステップS61において、ランダムに選ばれた格子点に存在する個体と、それを中心とした近傍の個体からなる地域的な小集団を一時的に形成する。

【0076】次にステップS62において、形成された小集団の中で、中心個体より「劣る」個体を調べ、その数だけの子個体を発生させる。ただし、すべての近傍の個体が中心個体に優越している場合でも、新しい子個体をつくる。なお「劣る」という表現は、ある個体が他の個体と比べてすべての評価基準において劣っていることを表し、「優越する」という表現は、すべての評価基準において優れていることを表す。

【0077】次にステップS63およびS64におい

$$n_G = \sum_{H \in P} S(d(G, H)) \dots \dots \dots (4)$$

ここで、

$$S(d) = \begin{cases} 1 - d/\sigma & (0 \leq d \leq \sigma) \\ 0 & (d > \sigma) \end{cases}$$

【0081】式(4)において、Pは小集団の全個体を表し、 $d(G, H)$ は、個体GおよびHのパラメータ空間でのユークリッド距離を表す。また、 σ はあらかじめ与えられる定数で、この値以上に離れている個体同士は、全く似てない個体とみなされる。式(4)によって計算される n_G は、ある個体に似た個体が小集団にどれくらい存在するかを示す指標である。

【0082】そこで、ステップS75において、子個体と個体Eのニッチ数を比較して、個体Eのニッチ数が子個体のニッチ数よりも大きい場合は、ステップS76において個体Eと子個体を置換する。

【0083】以上の処理によりステップS66の置換処理が終了し、ステップS63からステップS66までを

て、ステップS62によって決められた個数の子個体が、図8に示す交叉によって生成され、その際に突然変異も発生する。ステップS64の交叉における一方の親は中心に存在する個体であり、残りの親は近傍に存在する個体からランダムに選ばれる。交叉によって子個体が生成されると、物理モデルを計算しその子個体の複数基準の評価値が計算される。

【0078】ステップS65において子個体の適応度を評価基準、例えば平均二乗誤差の計算によって計算する。次にステップS66において、生成された子個体と小集団内からランダムに選ばれた一親（個体Eとよぶ）との優越関係によって、置換処理を行うか否かを決定する。その置換処理を図15のフロー図により説明する。図15のステップS71において、子個体が個体Eに優越していた場合には、子個体と個体Eを置換する（ステップS72）。逆に、ステップS73において個体Eが子個体に優越していた場合は、置換は行わない。

【0079】そのどちらでもない場合は、シェアリングとよばれる手法によって置換を行うか否かを決定する。シェアリング置換は、具体的には、ステップS74において個体Eおよび子個体の小集団内におけるニッチ数の計算値を基に行う。ニッチ数 n_G は次の式(4)によって計算される。

【0080】

【数4】

ステップS62で決定された子個体の数だけ繰り返す。そして、ステップS67の判断で探索終了条件が満たされたときに、最適化処理は終了する。そして、ステップS4において、ユーザーが探索の結果得られたパレート最適解のなかから最も適したフィッティングパラメータを選択肢、それを物理モデルのパラメータとする。なお、ステップS67で終了条件が満たされない場合は、ステップS61に戻って探索を続ける。

【0084】更に、一定回数繰り返しても探索終了条件を満たす染色体（フィッティングパラメータ値）が得られない場合には、ステップS68で現在の集団は初期収束をおこしていると判断され、再度初期集団の生成処理を行う。当然ながら、集団全部を生成し直さず、そのう

ちの50%の個体をランダムに新規に生成して入れ替えるようにしてもよく、また、やり直しをせずに、実験結果が物理モデルで説明できる範囲に収まっていないという警告を出して停止するようにしてもよい。

【0085】上述の本発明の第2実施例では、フィッティングの評価基準を複数使い、それらを重み係数によって単一化するのではなく、遺伝的アルゴリズムをもちいて複数のパレート最適解を直接探索する。従って、人手により重み係数を選ぶための試行錯誤を必要とすることなく、いくつかの評価基準において最適である物理モデルのフィッティングパラメータを短い計算時間で同時に発見することができる。

【0086】次に本発明の第3実施例について説明する。本発明の第1実施例、第2実施例では、フィッティングすべき測定データの組（単一実験条件での結果）一組でフィッティングパラメータを決定した。しかし、実際の測定では、ある実験条件を何段階かに変化させて、その段階ごとに測定データの組を取得する場合が多い。その場合は、測定データの組が複数になる。B+注入実験（図16、図17）では、実験条件のひとつである加速エネルギーを10段階に変化させて、10組の測定データを取得した。

【0087】このように測定データの組が複数になる場合は、それぞれの測定データごとに独立にフィッティングパラメータを決定する場合が多い。（第1実施例、第2実施例がこの場合に該当する。）その場合、決定したフィッティングパラメータと変化した実験条件の関係をプロットすると、なめらかに変化しない場合が生じる。図18から図21に、上記実験結果例における、加速エネルギー値（実験条件）とフィッティングパラメータの関係を図示する。図18～図21より、フィッティングパラメータ R_p 、 σ_p は、加速エネルギー E に対してある程度なめらかに変化しているが、フィッティングパラメータ γ 、 β はなめらかに変化していないことが分かる。

【0088】図20、図21のようにフィッティングパラメータがなめらかに変化しない場合、物理モデルを求めようとするときに問題が生じる。物理モデルの計算時には、実験を行っていない実験条件では、既に実験して得られたフィッティングパラメータ間の補間を行ってパラメータを求める。例えば、上記実験では、加速エネルギーが150keVの場合の実験を行っていない。

【0089】その場合、既に実験を行った加速エネルギーが100keVと200keVである場合の測定データにより得られたフィッティングパラメータの平均をとることでフィッティングパラメータは近似されることになる。このため、決定されたフィッティングパラメータが実験条件に対してなめらかに変化していない場合には、補間したパラメータは急激に変化してしまい、物理モデルによる有効なシミュレーションを行うことができ

なくなる。

【0090】この問題を解決するために、本発明の第3実施例は、測定データを基に得られた実験条件間のフィッティングパラメータをなめらかに変動するようにパラメータをフィッティングする、総合的に最適なフィッティングパラメータを決定する方法である。

【0091】図22は、本発明の第3実施例による、物理モデルの最適フィッティングパラメータを決定する処理方法のフロー図を示す。第3実施例はステップS80、ステップS82、S83の処理を行う点で第1実施例、第2実施例と相違する。ステップS82A、S82Bの処理は図11のステップS35～S38に相当する。第1実施例の先ず、ステップS80で、物理量の離散的な測定データの組を、実験条件を段階的に変化させて複数用意する。

【0092】次のステップS81で、その測定データにフィッティングさせる物理モデルを仮定し、次のステップS82において後述する遺伝的アルゴリズムの手法によってステップS82Aで仮定した物理モデルのパラメータを実験条件毎の測定データ組に対して最適化し、更にステップS82Bで実験条件間のフィッティングパラメータの変化をなめらかにするように総合的に最適フィッティングし、最後にステップS83で最終的な物理モデルのパラメータを決定する。

【0093】次に本第3実施例で用いる遺伝的アルゴリズムの手法について説明する。この遺伝的アルゴリズムでは、複数のパラメータを同時に決定するために生じるステップS82における計算時間の増大を回避するために、ステップS82で公知の局所的探索手法を併用する。ステップS82で、計算時間が増大しない場合には、局所的探索手法を併用する必要はない。

【0094】また、実験条件間のフィッティングパラメータのなめらかさを定量的に評価するために、ステップS82Bで、実験条件間のフィッティングパラメータをなめらかな関数（フィッティング関数）で更にフィッティングし、その結果を遺伝的アルゴリズムでの評価関数（適応度）計算で用いる。

【0095】以下、本発明の第3実施例を詳細に説明する。

(a) 染色体の表現方法：本実施例では、遺伝的アルゴリズムの染色体表現としてそれぞれの実験条件における物理モデルのパラメータを直列に並べたものを用いる。これを図23の例を参照して説明する。遺伝的アルゴリズムの染色体構造は実験条件 j ($j=1, \dots, m$) に対する物理モデルのパラメータ値 ($\alpha_j, \beta_j, \gamma_j, \theta_j, \phi_j$) に一対一に対応させる。

【0096】図23の例では実験条件1における物理モデルのパラメータ値が (+2.31, -6.45, -3.28, +3.55, -4.12) であったとき、遺伝的アルゴリズムの実験条件1に対応する染色体は (+2.31, -6.45, -3.28, +3.55,

-4.12) となる。図23の例では、パラメータの個数すなわち遺伝子の個数は $5 \times m$ 個であるがこの個数は仮定した物理モデルのパラメータ個数によって異なる。B+注入実験に適用した場合では、パラメータの個数は $4 \times 10 = 40$ 個となる。

【0097】(c) 選択淘汰方法：選択淘汰方法は、第1実施例で示した方法を用いる。

(d) 交叉方法：交叉方法は、第1実施例で示した方法を用いる。

(e) 突然変異方法：突然変異方法は、すべての遺伝子に対して、確率 P_m で、遺伝子の値を乱数で初期化する方法を用いる。

(f) 探索終了条件：個体の適応度が所定の条件を満たしたときに探索は終了する。ここでは、例えば、集団中の最大の適応度があらかじめ定めたいきい値を越えた場合とすればよい。

【0098】(b) 個体の評価関数：遺伝的アルゴリズムの個体の評価関数つまりは適応度としては、実験条件毎に計算した平均二乗誤差（図6の例1）を、すべての実験条件で加算した値を用いる。ただし、平均二乗誤差を計算する前に、それぞれの実験条件において、計算時間を短縮するために局所的探索手法を用いてフィッティングパラメータの最適化を行う。局所的探索手法の初期値（探索開始点）は、染色体で規定されている値を用いる。

【0099】局所的探索手法としては、準ニュートン法を用いればよい。またそれ以外に、公知の最急降下法やパウエル法などの手法を用いてもよい。この操作によって、局所的な最適化は公知の手法が担当し、公知の手法の初期値を遺伝的アルゴリズムで大域的に最適化する、というそれぞれの手法が最も得意な部分で分担できるので、パラメータ数増加に伴う計算時間の増加を抑えることができる。

【0100】局所的な最適化とは、ローカルミニマムの値を精度よく求めることを意味し、大域的な最適化とは、ローカルミニマムが探索空間中に複数存在する場合、ひとつのローカルミニマムに捕らわれないために、なるべく多くの部分空間で探索を行うことを意味する。この意味において、第1実施例および第2実施例の場合では、局所的な最適化および大域的な最適化をいずれも遺伝的アルゴリズムが担当する。本発明による遺伝的アルゴリズムでは、個体の集団内での交叉が探索の初期に

大域的な最適化を行い、探索の終盤で局所的な最適化を行う。

【0101】しかし交叉および突然変異の処理ステップは、勾配情報を用いずに乱数的に探索を行う操作であるので、最適化すべきパラメータが増大した場合、精度よく局所的な最適化をするためには計算時間が非常にかかる。そこで第3実施例では、局所的な最適化に公知の局所的探索手法を用いて計算時間を短縮する。

【0102】上述した実施例3における(b)で定めた評価関数では、実験条件間のフィッティングパラメータのなめらかさをまだ定量的に評価（検出）することができない。図24は遺伝的アルゴリズムの個体の評価処理を行う処理フローで、図22のステップS82A、S82Bの処理を行うフロー図であって、上記なめらかさを考慮して個体の適応度を計算する。突然変異処理と置換処理との間の処理を行う工程である。まず、ステップS90（S90-1～S90-m）において、上述したように、準ニュートン法によりm通りの実験条件におけるn個のフィッティングパラメータをそれぞれ独立に評価することにより最適化する。つぎにステップS91において、求めたフィッティングパラメータを、変化した実験条件の値を引数とするなめらかな関数（フィッティング関数）でパラメータ毎に独立にフィッティングする。

【0103】B+注入実験（図16、図17）では、変化した実験条件は加速エネルギーの値Eである。なめらかな関数として、例えば、次の式（5）の関数を用いることができる。このなめらかな関数をフィッティングする方法としては、第1実施例または第2実施例の方法を用いてもよいし、計算時間が短縮できる準ニュートン法を用いてもよい。

【0104】B+注入実験の場合、加速エネルギーEを引数とし、ステップS90で求める10（実験条件数） \times 4（パラメータ数）=40個のフィッティングパラメータ値を、パラメータ毎（ R_p , σ_p , γ , β ）に独立に10個のデータに対してフィッティングする。そのフィッティングの結果、それぞれのパラメータ毎に次の（5）式のフィッティングパラメータ q_i , r_i , s_i が4組求まることになる。

【0105】

【数5】

$$G_i(E) = q_i E^{r_i} + s_i \cdot \dots \cdot (5)$$

【0106】次に、ステップS92（S92-1～S92-n）において、ステップS91において求めたなめらかな関数（フィッティング関数）を用いて、各実験条件における物理モデルのフィッティングパラメータを計算し、その値を用いて実測データに対する平均二乗誤

差を再計算する。

【0107】図25はその詳細なフロー図である。まずステップS100（S100-1ないしS100-n）において、実験条件jにおける物理モデルのフィッティングパラメータの値を、ステップS91において求め

たフィッティング関数を用いてパラメータ毎に求める。
B+注入実験の場合、例えば実験条件1においては、加速エネルギーが100 KeVであるので、 $E=100$ を式(5)に代入し、ステップS91で求めた q_i , r_i , s_i を用いてパラメータ R_p , σ_p , γ , β をそれぞれ求める。

【0108】次に、ステップS101では、ステップS100 (S100-1~S100-n) で計算したフィッティングパラメータによって実験条件jにおける物理モデルを確定し、その物理モデルを使用して実験条件jでの実験のシミュレーションをする。例えば、B+注入実験での実験条件1の場合、加速エネルギーが100 KeVの場合のB+注入濃度分布をシミュレーションする。

【0109】最後にステップS102において、ステップS101での実験のシミュレーション結果と、実際の実験条件jでの実測データとの誤差を計算し、最終的な実験条件jにおける平均二乗誤差を求める。例えば、B+注入実験における実験条件1の場合、図16に破線で示した実測データとシミュレーション結果との平均二乗誤差を求める。

【0110】ステップS92においては、上記ステップS100~ステップS102を実験条件毎に実行し、それぞれの実験条件における平均二乗誤差を求める。最後に、ステップS93において、ステップS92 (S92-1~S92-m) において求めた各実験条件での平均二乗誤差を加算し、総合的な遺伝的アルゴリズムの個体の適応度とする。なお、平均二乗誤差を加算するときに、重視すべき実験条件がある場合は、その実験条件に重み付けをして加算してやればよい。

【0111】以上のパラメータのフィッティング最適化方法によると、図20、図21に例示したような、なめらかでないデータをなめらかな関数でフィッティングした場合、ステップS101の再計算で確定するフィッティングパラメータが、ステップS90において各実験条件で独立に求めた値から大幅にずれることになり、ステップS92での最終的な平均二乗誤差が増大する。それによって、実験条件間のフィッティングパラメータのなめらかさを定量的に検出できる。

【0112】以上のように、染色体の表現方法、個体の適応度、交叉方法、突然変異方法、選択淘汰方法、探索終了条件を決め、遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータの総合的な最適化を行う。処理フローは、図22のステップS82の部分で、図11の第1実施例とほぼ同様の処理をすればよい。図11の第1実施例と相違する部分について以下説明する。

【0113】まず、図11のステップS35~S38の処理は、図24の評価処理をそれぞれ用いればよい。また、ステップS34の突然変異処理は、上記(e)で説明した方法を用いればよい。ステップS40で最適化処

理が終了した後、図22のステップS83では、その時点での個体集団中で最も適応度が高い個体の、ステップS100 (ステップS-1ないしS100-n) で求めたフィッティングパラメータ群を遺伝的アルゴリズムで得られたフィッティングパラメータとする。また、実測しなかった実験条件に対する物理モデルのフィッティングパラメータも、ステップS91において求めたなめらかな関数を用いて簡単に計算することができる。

【0114】以下に、B+注入実験結果のデータに対して、本実施例による遺伝的アルゴリズムを用いた最適フィッティングパラメータ決定方法を適用した場合の計算結果を示す。

【0115】仮定した物理モデルや、制約条件、実験条件は第1実施例と同一である。実験の結果得たフィッティングパラメータを図26~図29に示す。図18~図21の実験結果と比較して、加速エネルギーに対してなめらかにパラメータがフィッティング最適化できていることがわかる。実測データに対する最適な物理モデルのフィッティング結果は、図16、図17とほぼ同様にきれいにフィッティングできていた。この実験により、第3実施例の最適化方法の有効性が確認できた。

【0116】上述したように、本実施例のフィッティングパラメータ最適化方法では、実験条件が複数存在する場合においても、実験条件間のフィッティングパラメータのなめらかさを考慮した上で、総合的に最適な物理モデルのフィッティングパラメータを求めることができる。従って、なめらかなフィッティングパラメータを得るための人手による試行錯誤を必要とすることなく短い計算時間で効率的に物理モデルのフィッティングパラメータを最適化することができる。これにより、最適化した物理モデルをTCAD (Technology (AD) 等の設計ツールで使用することができる。

【0117】本発明は、第1実施例~第3実施例の方法を実施する最適フィッティングパラメータ決定装置を提供する。図30は、第1実施例および第2実施例の最適フィッティングパラメータ決定装置を実施する最適フィッティングパラメータ決定装置の機能的ブロック図を示す。フィッティングパラメータ最適化装置10は、個体の適応度を算出する適応度算出手段11、個体集団の中から個体を選択し、交叉、突然変異、置換等の遺伝的操作を行う遺伝的操作処理手段12、個体集団が探索終了条件を満たすか否かの評価を行う評価手段13、メモリ14、入出力手段15を有している。これらの適応度算出手段11、遺伝的操作処理手段12、評価手段13は、各々独立したCPUで構成されてもよいし、ひとつのCPUを時分割で使用することにより構成してもよい。

【0118】CPUは、メモリ14の所定領域に格納されている所定のプログラムを起動させ、そのプログラムに従って各処理工程を実行する。メモリ14には、遺伝

的アルゴリズムの個体の情報（染色体、適応度）および計測した実験データも格納される。物理モデル計算装置 16 は、メモリ 16M、CPU を有し、メモリ 16M の所定領域に格納されている所定のプログラムに従って、物理モデルを計算し、その結果を出力する。

【0119】物理モデル計算装置 16 はフィッティングパラメータ最適化装置 10 に含まれてもよい。その場合は、図 31 に示すように、フィッティングパラメータ最適化装置 10 は適応度算出手段 11、遺伝的操作処理手段 12、評価手段 13、メモリ 14、物理モデル計算手段 17 とを含み、適応度算出手段 11、遺伝的操作処理手段 12、評価手段 13 はメモリ 14 と物理モデル計算手段 17 とを共有する。

【0120】最適化処理においては、まず入出力手段 15 内のキーボードなどから、実験データを予測するため物理モデルが選定され、その情報が物理モデル計算装置 16 に与えられる。また、遺伝的アルゴリズムにおける、集団の個体数、交叉確率、突然変異確率などの定数も入力手段 15 からフィッティングパラメータ最適化装置 10 に与えられ、メモリ 14 の所定領域に記憶される。その後、メモリ 14 の所定領域に格納されている所定のプログラムに従って、CPU が処理を開始する。

【0121】適応度算出手段 11 では、物理モデル計算装置 16 に、実験データを与えたのち、物理モデル計算を開始させるための信号を送る。物理モデル計算装置 16 で物理モデルの計算が終了したのち、その計算結果（シミュレーション結果）データがフィッティングパラメータ最適化装置 10 に渡される。そのデータを用いて、適応度算出手段 11 で適応度が計算されメモリ 14 に格納される。遺伝的操作処理手段 12 では、11 で定まった適応度を用いて、各種遺伝的操作を行い、その結果をメモリ 14 に格納する。評価手段 13 は、遺伝的アルゴリズムの終了条件を計算し、それが満たされた場合には、最終的な最適フィッティングパラメータを決定し、メモリ 14 に格納するとともに、入出力手段 15 内のプリンタや CRT などに表示する。

【0122】図 32 は、第 3 実施例の最適フィッティングパラメータ決定方法を実施する最適フィッティングパラメータ決定装置の機能的ブロック図を示す。フィッティングパラメータ最適化装置 10 は、図 30 と同様の適応度算出手段 11、遺伝的操作処理手段 12、評価手段 13、メモリ 14、入出力手段 15 を有するとともに、局所的探索手法処理手段 18、パラメータフィッティング処理手段 19 を有する。これらの適応度算出手段 11、遺伝的操作処理手段 12、評価手段 13、局所的探索手法処理手段 18、パラメータフィッティング処理手段 19 は、各々独立した CPU で構成されてもよいし、ひとつの CPU を時分割で使用することにより構成してもよい。物理モデル計算装置 16 は図 31 と同様に図 33 に示すようにフィッティングパラメータ最適化装置 10 に含まれてもよい。

0 に含まれてもよい。

【0123】最適化処理においては、まず入出力手段 15 内のキーボードなどから、実験データを予測するため物理モデルが選定され、その情報が物理モデル計算装置 16 に与えられる。また、遺伝的アルゴリズムにおける、集団の個体数、交叉確率、突然変異確率、局所的探索手法のステップ幅などの諸定数も入力手段 15 からフィッティングパラメータ最適化装置 10 に与えられ、メモリ 14 の所定領域に記憶される。その後、メモリ 14 の所定領域に格納されている所定のプログラムに従って、CPU が処理を開始する。

【0124】適応度算出手段 11 では、物理モデル計算装置 16 に、複数条件での実験データを与えたのち、局所的探索処理手段 18 に局所的最適化計算を開始させるための信号を送る。局所的探索処理手段 18 では、物理モデル計算装置 16 とデータのやりとりを繰り返し、局所的な最適化計算を行う。局所的探索処理手段 18 で局所的最適化計算が終了したのち、その計算結果データがメモリ 14 に格納される。局所的探索処理手段 18 では、実験条件の数だけ上記局所的最適化計算を行い、すべての計算結果がメモリ 14 を通して適応度算出手段 11 に渡される。

【0125】つぎに、適応度算出手段 11 では、パラメータフィッティング手段 19 になめらかな関数によるフィッティング計算を開始させるための信号を送る。パラメータフィッティング手段 19 では、メモリ 14 に格納された局所的最適化計算結果のフィッティングパラメータに対して、フィッティング関数を計算して求める。その計算結果データがメモリ 14 に格納され、適応度算出手段 11 に渡される。

【0126】適応度算出手段 11 では、そのフィッティングパラメータを、再度物理モデル計算装置 16 に送り、物理モデル計算装置 16 に計算を開始させる。物理モデル計算装置 16 の計算結果は、フィッティングパラメータ最適化装置 10 に渡され、メモリ 14 に格納される。そのデータを用いて、適応度算出手段 11 で適応度が最終的に計算されメモリ 14 に格納される。遺伝的操作処理手段 12 では、適応度算出手段 11 で定まった適応度を用いて、各種遺伝的操作を行い、その結果をメモリ 14 に格納する。評価手段 13 は、遺伝的アルゴリズムの終了条件を計算し、それが満たされた場合には、最終的な最適フィッティングパラメータを決定し、メモリ 14 に格納するとともに、入出力手段 15 内のプリンタや CRT などに表示する。

【0127】更に、本発明は、前記説明した最適フィッティングパラメータ決定方法の図 2、図 3、図 7、図 10～図 15、図 22、図 24 および図 25 の処理手順をコンピュータに実施させる最適フィッティングパラメータ決定プログラムを提供する。本発明の最適フィッティングパラメータ決定プログラムは記録媒体又はインター

ネットにより、例えば図30～図33のような各手段を構成したコンピュータの入出力装置を介してインストールされ、単数又は複数のメモリに格納される。これによって、コンピュータは本発明の方法を実施する装置となる最適フィッティングパラメータ決定装置となる。

【0128】本発明は、いうまでもなく、複数のパラメータを含んだ物理モデルのすべてのパラメータ、またはパラメータの一部、あるいは複数モデルが統合されたモデルのパラメータ、何れにも適応可能であり、物理モデルの規模を問わず、それらの応用は本発明の範囲から除外されるものではない。

【0129】以上、図示例を参照して本発明を説明したが、この発明は上述の例に限定されるものでなく、特許請求の範囲の記載の範囲内で当業者が容易に改変し得るもの構成をも含むものである。

【0130】

【発明の効果】以上説明したように、本発明によれば、次のような効果を得ることができる。物理モデルのフィッティングパラメータを実数ベクトルとして表現し、前記染色体を持つ複数の個体の集団を用意して遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータを最適化することにより、染色体の情報を離散化する処理が不要となり、離散化の精度によって得られる解の精度及び計算時間が影響されるということがなくなる。

【0131】さらに、前記遺伝的アルゴリズムが、少なくとも二つの親個体を選択する選択処理工程と、前記選択された親個体に対して、遺伝的操作として交叉処理および突然変異処理の少なくともいずれかを適用することにより、複数の子個体を新たに生成する子個体生成工程と、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、次世代集団の個体とすべき個体を決定する置換処理工程とを、少なくとも備えることにより、局所的な最適解にとらわれることなく、極めて有効に探索を進めることができる。

【0132】前記遺伝的アルゴリズムの子個体生成工程における交叉処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体おのおの実数ベクトル成分に基づいて設定されることにより、集団中の親同士との距離が離れている探索序盤では大域的に探索を行い、親同士との距離が近い探索終盤では局所的に探索を行うことができる。

【0133】前記遺伝的アルゴリズムの子個体生成工程における突然変異処理は、連続的な所定の生起確率分布に従って出現する値を成分とする実数ベクトルを子個体として生成し、前記生起確率分布は前記選択された親個体のうち少なくとも一つの親個体に近づくに連れて生起確率が高くなることにより、突然変異処理において、有効に局所的な探索を行うことができる。

【0134】前記遺伝的アルゴリズムの選択処理工程に

おいて、三つの親個体を選択し、前記生起確率分布は、前記選択された三つの親個体のうち二つの親個体の中点を中心とした正規分布であって、正規分布の標準偏差は、前記二つの親個体の実数ベクトルを結ぶ主軸方向の成分が前記二つの親個体の距離に比例し、それ以外の軸の成分が選択された三つの親個体のうち残り一つの親個体と主軸との距離に比例することにより、個体集団の分布を保ちつつ集団中の親同士との距離が離れている探索序盤では大域的に探索を行い、親同士との距離が近い探索終盤では局所的に探索を行うことができる。

【0135】前記遺伝的アルゴリズムの複数の個体の集団を格子点上に配置し、前記選択処理工程において、各個体と近傍の所定数の個体との間で地域的な小集団を形成し、地域的な小集団の中から少なくとも二つの親個体を選択することにより、集団全体が一つの遺伝子型に急速に統一されるという初期収束をなくすることができる。

【0136】前記遺伝的アルゴリズムの置換処理工程において、前記選択された親個体と前記複数の子個体から、1種類の評価基準がより優れている個体を次世代集団の個体とすることにより、複数の評価基準を1種類の評価基準に縮約することで計算時間を短縮できる。

【0137】前記遺伝的アルゴリズムの置換処理工程において、選択された親個体と前記複数の子個体から、2種類以上の評価基準の優越関係に基づいて次世代集団の個体を決定することにより、各評価基準に適合する複数の最適解を基に総合的に判断した最適フィッティングパラメータを求めることができる。

【0138】前記遺伝的アルゴリズムを用いて最適化したフィッティングパラメータに対して、局所的探索手法による最適化を行うことにより、探索の終盤における探索速度の低下を防止して、フィッティングパラメータの精度をより向上することができる。

【0139】測定データの実験条件の組毎に物理モデルの最適なフィッティングパラメータを求め、更に、実験条件間においてフィッティングパラメータがなめらかに変化するように総合的にフィッティングした物理モデルを求めることにより、実験を行っていない実験条件においても誤差なく物理現象を物理モデルでシミュレーションできる。

【図面の簡単な説明】

【図1】物理モデルによる測定データのフィッティングを説明するための説明図である。

【図2】本発明のフィッティングパラメータ最適化方法の処理手順の概略を示すフロー図である。

【図3】一般的な遺伝的アルゴリズムの手順の概略を示すフロー図である。

【図4】一般的な遺伝的アルゴリズムで用いる染色体を例示する説明図である。

【図5】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで用

いる染色体とそれにより最適化されたフィッティングパラメータを示す説明図である。

【図6】第1実施例の遺伝的アルゴリズムで用いる適応度を説明する図である。

【図7】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで行う交叉処理の手順を示すフロー図である。

【図8】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで行う交叉処理例を説明する図である。

【図9】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで行う突然変異処理の手順を示す説明図である。

【図10】本発明の方法における遺伝的アルゴリズムで行う置換処理の手順を示すフロー図である。

【図11】第1実施例の遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータ最適化を行う処理の手順を示すフロー図である。

【図12】第1実施例の変形例における地域的な小集団を例示的に説明する図である。

【図13】第1実施例の変形例における選択処理の手順を示すフロー図である。

【図14】第2実施例の遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータ最適化を行う処理の手順を示すフロー図である。

【図15】第2実施例の置換処理の手順を示すフロー図である。

【図16】第1実施例のフィッティングパラメータ最適化計算されたフィッティング曲線（実験条件1）を示す図である。

【図17】第1実施例のフィッティングパラメータ最適化計算されたフィッティング曲線（実験条件10）を示す図である。

【図18】実験条件毎に計算したフィッティングパラメータ R_p の変化を説明する図である。

【図19】実験条件毎に計算したフィッティングパラメータ σ_p の変化を説明する図である。

【図20】実験条件毎に計算したフィッティングパラメータ γ の変化を説明する図である。

【図21】実験条件毎に計算したフィッティングパラメータ β の変化を説明する図である。

【図22】第3実施例の遺伝的アルゴリズムを用いてフィッティングパラメータ最適化を行う処理の手順を示す

フロー図である。

【図23】第3実施例における、染色体、遺伝子と実験条件、フィッティングパラメータとの対応を示す図である。

【図24】第3実施例のなめらかさ考慮した適応度計算の処理手順を示すフロー図である。

【図25】第3実施例のある実験条件における平均自乗誤差の計算の処理手順を示すフロー図である。

【図26】第3実施例によって計算されたフィッティングパラメータ R_p の変化を説明する図である。

【図27】第3実施例によって計算されたフィッティングパラメータ σ_p の変化を説明する図である。

【図28】第3実施例によって計算されたフィッティングパラメータ γ の変化を説明する図である。

【図29】第3実施例によって計算されたフィッティングパラメータ β の変化を説明する図である。

【図30】第1実施例、第2実施例の方法を実施するフィッティングパラメータ最適化装置の機能的ブロック図である。

【図31】第1実施例、第2実施例の方法を実施するフィッティングパラメータ最適化装置に物理モデル計算手順が含まれる場合の機能的ブロック図である。

【図32】第3実施例の方法を実施するフィッティングパラメータ最適化装置の機能的ブロック図である。

【図33】第3実施例の方法を実施するフィッティングパラメータ最適化装置に物理モデル計算手順が含まれる場合の機能的ブロック図である。

【符号の説明】

- 10 フィッティングパラメータ最適化装置
- 11 適応度算出手段
- 12 遺伝的処理手段
- 13 評価手段
- 14 メモリ
- 15 入出力手段
- 16 物理モデル計算装置
- 16M メモリ
- 17 物理モデル計算手段
- 18 局所的探索手法処理手段
- 19 パラメータフィッティング処理手段

**This Page is Inserted by IFW Indexing and Scanning
Operations and is not part of the Official Record**

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images include but are not limited to the items checked:

- ☐ **BLACK BORDERS**
- ☐ **IMAGE CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES**
- ☐ **FADED TEXT OR DRAWING**
- ☐ **BLURRED OR ILLEGIBLE TEXT OR DRAWING**
- ☐ **SKEWED/SLANTED IMAGES**
- ☐ **COLOR OR BLACK AND WHITE PHOTOGRAPHS**
- ☐ **GRAY SCALE DOCUMENTS**
- ☒ **LINES OR MARKS ON ORIGINAL DOCUMENT**
- ☐ **REFERENCE(S) OR EXHIBIT(S) SUBMITTED ARE POOR QUALITY**
- ☐ **OTHER:** _____

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

As rescanning these documents will not correct the image problems checked, please do not report these problems to the IFW Image Problem Mailbox.